Πανεπιστημιο Ιωαννινων
Τμημα Δ. Π. Φ. Π.

Δρ. Μιχάλης Τζούμας
Μαθηματικός

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

ΣΤΟΥΣ

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΥΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥΣ

ΑΓΡΙΝΙΟ 2004

Περιεχόμενα

Κατάλογος Σχημάτων

Κατάλογος Πινάκων

Πρόλογος

Οι σημειώσεις αυτές γράφτηκαν για να βοηθήσουν τους δευτεροετείς φοιτητές του τμήματος Διαχείρησης Περιβάλλοντος και Φυσικών Πόρων του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, να κατανοήσουν βασικά σημεία της Αριθμητικής Ανάλυσης, να χρησιμοποιηθούν ως ένα βασικό εισαγωγικό βιβλίο για εκείνους, που θα χρησιμοποιήσουν τις αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση προβλημάτων ή τη δημιουργία μοντέλων της επιστήμης τους και να τους μυήσουν σε έναν καινούργιο τρόπο σκέψης σε ό,τι αφορά τα Μαθηματικά, που είναι μεν ενιαία, ωστόσο υπάρχουν πολλές οπτικές για τις έννοιες τις οποίες διαπραγματεύονται.

Στο κείμενο γίνεται προσπάθεια οι μαθηματικές έννοιες και οι μαθηματικοί τύποι που χρησιμοποιούνται να είναι γνωστοί από τα Μαθηματικά του Λυκείου και τα Μαθηματικά που οι φοιτητές έχουν διδαχθεί στο Α΄ έτος του τμήματος. Όπου χρειάζονται κάποιες καινούργιες έννοιες ή τύποι, θα εισάγονται ή θα αποδεικνύονται τη στιγμή που θα χρησιμοποιούνται. Για την εμπέδωση της ύλης υπάρχει ένας αριθμός λυμένων παραδειγμάτων και ένας αριθμός άλυτων ασκήσεων στο τέλος κάθε κεφαλαίου. Για τη λύση των περισσότερων ασκήσεων, που είναι υπολογιστικές, είναι απαραίτητη η χρήση επιστημονικής αριθμομηχανής (calculator, κομπιουτεράκι), την οποία ο φοιτητής θα πρέπει να μάθει να χειρίζεται καλά, ή η χρήση οποιουδήποτε Μαθηματικού Πακέτου Ηλεκτρονικού Υπολογιστή (Γλώσσα προγραμματισμού, Matlab, Mathematica, κ.λ.π.), η οποία επιβάλλεται αν υποτεθεί ότι κάποιος ασχολείται σοβαρά με Επιστημονικούς Υπολογισμούς. Στο κείμενο υπάρχει ένας αριθμός προγραμμάτων, τα οποία έγινε προσπάθεια να γραφούν με τον απλούστερο τρόπο, που θα πρέπει να δοκιμάζονται από τον αναγνώστη, ώστε να εξοικειώνεται με τα Μαθηματικά Πακέτα και να τα χρησιμοποιεί κατά περίπτωση.

Εισαγωγή

1.1 Γενικά

Δεν μπορεί με βεβαιότητα κάποιος να πει αν έγιναν πρώτα τα Μαθηματικά και μετά οι υπολογισμοί ή πρώτα οι υπολογισμοί και μετά τα Μαθηματικά και ούτε έχει σημασία. Εκείνο που μπορούμε όμως με σιγουριά να πούμε σήμερα, είναι ότι δεν μπορούν να γίνουν υπολογισμοί χωρίς Μαθηματικά και Μαθηματικά χωρίς υπολογισμούς. Λέγοντας υπολογισμούς, εννοούμε την εύρεση ενός αποτελέσματος χρησιμοποιώντας τις τέσσερις πράξεις τις αριθμητικής μόνον. Η κύρια επιστήμη που ασχολείται με μεθόδους υπολογισμών είναι η Αριθμητική Ανάλυση. Λέγοντας μεθόδους υπολογισμών, εννοούμε τύπους και αλγορίθμους που μας βοηθούν στο να βρούμε το επιθυμητό αριθμητικό αποτέλεσμα, από ένα πλήθος δεδομένων που διαθέτουμε. Φυσικά μιλάμε για τύπους εύχρηστους και αλγορίθμους, οι οποίοι θα δίνουν το αποτέλεσμα σε λογικούς χρόνους (αποτελεσματικούς).
Στην αρχαιότητα ασχολήθηκαν με το θέμα μας οι Βαβυλώνιοι, οι Αιγύπτιοι και φυσικά οι Έλληνες, που ανήγαγαν τους υπολογισμούς σε επιστήμη, όπως έκαναν και με τους άλλους κλάδους των Μαθηματικών. Χαρακτηριστικά αναφέρουμε τον Αρχιμήδη, που με τη μέθοδο των προσεγγίσεων μπόρεσε να υπολογίσει τιμή για το π και τον Ήρωνα, που έδωσε αλγόριθμο για την εύρεση της τετραγωνικής ρίζας ενός αριθμού, έναν αλγόριθμο που η γενική του μορφή δόθηκε 1800 χρόνια αργότερα. Η επιστήμη των υπολογισμών έμεινε για πολλά χρόνια καθηλωμένη, μέχρι την εποχή της αναγέννησης περίπου, που αρχίζει να αναπτύσσεται και πάλι. Από την περίοδο του διαφωτισμού και μετά οι υπολογισμοί γνωρίζουν άνθιση, όπως όλες οι επιστήμες. Όμως κύρια και ραγδαία ανάπτυξη γνωρίζουν μετά το μέσο του προηγούμενου αιώνα, παράλληλα με την ανάπτυξη των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών. Ο λόγος είναι ότι οι Ηλεκτρονικοί Υπολογιστές μπορούν

να κάνουν μόνον τις τέσσερις πράξεις της αριθμητικής. Έτσι για την επίλυση οποιουδήποτε προβλήματος, που σχετίζεται με μαθηματικά πέρα από τις πράξεις της αριθμητικής, πρέπει η λύση να μετατραπεί σε λύση, η οποία είναι πραγματοποιήσιμη με τις πράξεις αυτές και μόνον. Ωστόσο, επειδή μιλάμε για πράξεις της αριθμητικής αφενός και για πράξεις με τους Ηλεκρονικούς Υπολογιστές αφετέρου αναπόφευκτα μιλάμε για προσεγγίσεις και επομένως για σφάλματα. Τα σφάλματα και η μετάδοσή τους είναι ένα άλλο αντικείμενο με το οποίο ασχολείται η Αριθμητική Ανάλυση.

1.2 Σφάλματα

1.2.1 Ορισμοί

Η μέτρηση μιας ποσότητας με οποιονδήποτε τρόπο δίδεται με δυο τιμές, την ακριβή ή αληθή τιμή x και την προσεγγιστική τιμή ή απλά τιμή x^*. Στην προσεγγιστική τιμή x^* είναι ενσωματωμένο το σφάλμα ε, που πιθανά έχει γίνει. Δηλαδή έχουμε

$$x^* = x + \varepsilon \Longleftrightarrow \varepsilon = x^* - x \tag{1.1}$$

Φυσικά από την (1.1) εύκολα βρίσκουμε ότι η ακριβής τιμή μπορεί να προκύψει από τη σχέση $x = x^* - \varepsilon$. Τις περισσότερες φορές, καθώς θα δούμε στη συνέχεια, δε μας ενδιαφέρει η ακριβής τιμή του σφάλματος, αλλά το μέτρο του. Έτσι ενδιαφερόμεθα για το απόλυτο σφάλμα

$$|\varepsilon| = |x^* - x| \tag{1.2}$$

Για την ακρίβεια, ούτε και το απόλυτο σφάλμα θα το γνωρίσουμε ποτέ, αφού, για να το υπολογίσουμε, χρειαζόμαστε την ακριβή τιμή της ποσότητας, όταν όμως έχουμε την ακριβή τιμή της ποσότητας, τι μας ενδιαφέρει η προσεγγιστική και το σφάλμα; Έτσι συνήθως ψάχνουμε για φράγματα των απολύτων σφαλμάτων, δηλαδή κάποιον θετικό αριθμό φ για τον οποίο ισχύει $|\varepsilon| \leq \varphi$. Από την (1.2) και τις ιδιότητες των απολύτων τιμών μπορούμε να έχουμε μια εκτίμηση για το διάστημα στο οποίο ανήκει η ακριβής τιμή της ποσότητάς μας, όταν γνωρίζουμε την προσεγγιστική. Πράγματι μπορούμε να προσδιορίσουμε ότι $x \in [\, x^* - \varphi, x^* + \varphi \,]$.

Όμως το σφάλμα δεν είναι ανεξάρτητο της τιμής της ποσότητάς μας. Πράγματι, διαφορετική αξία έχει το σφάλμα που γίνεται στο δεύτερο δεκαδικό ψηφίο, αν μιλάμε για τιμές χιλιάδων και διαφορετική, όταν μιλάμε για απλές τιμές. Έτσι ορίζουμε το εκατοστιαίο ή σχετικό σφάλμα

$$\delta = \frac{\varepsilon}{x} \approx \frac{\varepsilon}{x^*}. \tag{1.3}$$

Από τον τύπο (1.3) συνήθως χρησιμοποιείται η προσεγγιστική έκφραση (γιατί;). Παρόμοιος με τον ορισμό του απολύτου σφάλματος είναι ο ορισμός του απόλυτου σχετικού σφάλματος, δηλαδή $|\delta| = |\frac{\varepsilon}{x}| \approx |\frac{\varepsilon}{x^*}|$

Παράδειγμα 1.1 *Να βρεθεί το διάστημα στο οποίο βρίσκεται η αληθής τιμή x μιας ποσότητας, αν γνωρίζουμε ότι η τιμή της 273.25 έχει σφάλμα το πολύ 0.2%.*

Λύση Το ότι το σφάλμα είναι το πολύ 0.2% σημαίνει ότι

$$|\delta| \leq 0.2\% \Longleftrightarrow |\frac{x^* - x}{x^*}| \leq 0.002 \Longleftrightarrow |273.25 - x| \leq 0.002 \cdot 273.25$$

οπότε $273.25 - 0.5465 \leq x \leq 273.25 + 0.5465$ ή $x \in [272.7035, 273.7965]$.

1.2.2 Τα είδη

Κατά τους Επιστημονικούς Υπολογισμούς δυο ειδών σφάλματα είναι δυνατόν να προκύψουν. Τα σφάλματα αποκοπής και τα σφάλματα στρογγύλευσης.

Σφάλματα αποκοπής

Πολλές φορές η λύση ενός προβλήματος προκύπτει ως το όριο μιας σειράς άπειρων όρων. Φυσικά είναι αδύνατο να υπολογίσουμε κάτι τέτοιο ακριβώς. Άλλες πάλι η λύση του προβλήματός μας πρέπει να βρεθεί μέσα από μια διαδικασία, η οποία συγκλίνει στην πραγματική λύση του προβλήματος, μετά από μια διαδικασία με άπειρο πλήθος βημάτων. Πάλι είναι αδύνατο να κάνουμε κάτι τέτοιο. Έτσι χρησιμοποιούμε κάποια κριτήρια, τα οποία δεχόμαστε ότι μας έχουν φέρει κοντά στη λύση, και σταματάμε τη διαδικασία ή τερματίζουμε τη σειρά χρησιμοποιώντας ένα πεπερασμένο πλήθος όρων. Προφανώς ένα πλήθος όρων της μιας ή της άλλης περίπτωσης έχει αποκοπεί. Τα σφάλματα αποκοπής λοιπόν προκύπτουν από την, με οποιονδήποτε τρόπο, αποκοπή και μη χρήση όρων, από

την ακριβή λύση του προβλήματος.
Για παράδειγμα από τον τύπο του Taylor είναι γνωστό ότι

$$e^x = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{x^i}{i!} \tag{1.4}$$

Ο υπολογισμός του $e^{0.25}$ θα απαιτούσε να αντικαταστήσουμε το x με το 0.25 στο δεύτερο μέλος της (1.4) και στη συνέχεια να βρούμε το άθροισμα των άπειρων όρων της σειράς. Όμως κάτι τέτοιο είναι αδύνατο. Χρησιμοποιούμε λοιπόν ένα προκαθορισμένο πλήθος από τη σειρά αυτή και ό,τι μένει (ένα πλήθος άπειρων όρων) είναι το σφάλμα αποκοπής που κάνουμε.
Για την εύρεση της $\sqrt{2}$ ο Ήρωνας είχε προτείνει τον εξής αλγόριθμο

$$x_{n+1} = \frac{1}{2}(x_n + \frac{2}{x_n}), \quad \text{με} \quad x_0 = 1 \tag{1.5}$$

Ο παραπάνω αλγόριθμος μετά από άπειρα βήματα μας προσδιορίζει την $\sqrt{2}$. Όμως όπως ο καθένας καταλαβαίνει, ποτέ δε θα μπορούσαμε να κάνουμε άπειρα βήματα, οπότε, μετά από k βήματα θα σταματούσαμε, και την τελευταία τιμή θα τη δεχόμαστε ως την προσεγγιστική τιμή της $\sqrt{2}$. Το σφάλμα αποκοπής στην περίπτωση αυτή είναι $\varepsilon = x_k - \sqrt{2}$.
Ωστόσο, ο αναγνώστης δεν πρέπει να μείνει με την εντύπωση ότι μόνον στην περίπτωση που έχουμε άπειρα βήματα εμφανίζονται σφάλματα αποκοπής. Πολλές φορές, στην ακριβή λύση φτάνουμε μετά από έναν προκαθορισμένο πεπερασμένο, αλλά πολύ μεγάλο, αριθμό βημάτων, οπότε και πάλι είμαστε υποχρεωμένοι να σταματήσουμε νωρίτερα, οπότε και πάλι έχουμε σφάλματα αποκοπής.

Άμεση σχέση με τα σφάλματα αποκοπής έχει η τάξη προσέγγισης. Πολλές φορές κάποια συνάρτηση $f(h)$ προσεγγίζεται από μια άλλη $g(h)$, τότε το σφάλμα είναι μια συνάρτηση $\varepsilon(h)$. Αν συμβεί το απόλυτο σφάλμα να φράσσεται από κάποια δύναμη του h επί κάποιο θετικό αριθμό, δηλαδή $|\varepsilon(h)| \leq M \cdot h^m$, λέμε ότι η προσέγγιση είναι τάξης του h^m ή απλά $O(h^m)$. Ο συμβολισμός $O(h^m)$ δε δίνει ακριβώς το σφάλμα που γίνεται, αλλά μια εκτίμηση του μεγέθους. Για τον παραπάνω συμβολισμό εύκολα μπορεί κάποιος να δείξει ότι ισχύουν

$$\begin{aligned} O(h^m) \pm O(h^n) &= O(h^r),\ \text{όπου } r = \max\{m,n\} \\ O(h^m) \cdot O(h^n) &= O(h^{m+n}) \\ h^n \pm O(h^n) &= O(h^n) \\ O(h^m)/h^n &= O(h^{m-n}) \\ A \cdot O(h^n) &= O(h^n),\ \text{όπου } A \in \mathbb{R} \\ h^k \cdot O(h^n) &= O(h^{k+n}),\ \text{όπου } k \in \mathbb{Z} \end{aligned} \tag{1.6}$$

Ο Τύπος του Taylor, γύρω από ένα σημείο x_0

$$f(x_0+h) = f(x_0) + \frac{h}{1!}f'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(x_0) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)$$

όταν η $f^{(n+1)}(x)$ είναι φραγμένη, παίρνει πλέον τη μορφή

$$f(x_0+h) = f(x_0) + \frac{h}{1!}f'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(x_0) + O(h^{n+1})$$

Σφάλματα στρογγύλευσης

Από το Γυμνάσιο και το Λύκειο είναι γνωστή η στρογγυλοποίηση ενός αριθμού σε k δεκαδικά ψηφία. Υπενθυμίζουμε ότι η στρογγυλοποίηση γίνεται με τον εξής απλό κανόνα: αν το πρώτο προς τα δεξιά ψηφίο, μετά το k δεκαδικό ψηφίο (δ.ψ.), είναι ένα από τα ψηφία $0, 1, 2, 3$ ή 4, αποκόπτεται αυτό και όλα τα επόμενα, διαφορετικά αποκόπτεται αυτό και όλα τα επόμενα και το ψηφίο της k δεκαδικής θέσης αυξάνεται κατά 1. Για παράδειγμα ο αριθμός $\pi = 3.14159...$ στρογγυλοποιείται σε 2 δ.ψ. σε $\pi = 3.14$ ενώ σε 3 δ.ψ. σε $\pi = 3.142$. Σε κάθε περίπτωση το σφάλμα στρογγύλευσης απολύτως είναι μικρότερο ή ίσο από το αποκοπτόμενο μέρος και πάντα ισχύει

$$|\varepsilon| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-k} \tag{1.7}$$

Η στρογγυλοποίηση γίνεται, επειδή, όταν κάνουμε υπολογισμούς, εμφανίζονται άρρητοι αριθμοί, όπως ο π, ο $\sqrt{2}$ κ.λ.π., ή εμφανίζονται ρητοί με άπειρο πλήθος όρων, όπως ο $\frac{1}{3}$, ο $\frac{2}{3}$ κ.λ.π. καθώς και όταν το φυσικό πρόβλημά μας δεν απαιτεί δ.ψ. από κάποια τάξη και πέρα. Η στρογγυλοποίηση είναι στενά συνδεδεμένη με την έννοια του σφάλματος. Έτσι:

Ορισμός 1.2.1 *Λέμε ότι ο αριθμός x^* προσεγγίζει τον x σε k δ.ψ. αν ισχύει*

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2}10^{-k}$$

Μια άλλη έννοια είναι η στρογγυλοποίηση σε k σημαντικά ψηφία (σ.ψ.). Σημαντικά ψηφία λέγονται όλα τα ψηφία του αριθμού, εκτός από τα μηδενικά που βρίσκονται στην αρχή του αριθμού. Για παράδειγμα ο αριθμός 23.432 έχει 5 σ.ψ. καθώς και ο αριθμός 0.0023432 έχει επίσης 5 σ.ψ. Η στρογγυλοποίηση του αριθμού σε k σ.ψ. γίνεται με τους κανόνες που γίνεται η στρογγυλοποίηση σε k δ.ψ. Η έννοια των σημαντικών ψηφίων συσχετίζεται με τον τρόπο αποθήκευσης των αριθμών στους Ηλεκτρονικούς Υπολογιστές. Εκεί η αποθήκευση γίνεται στο δυαδικό σύστημα, σε πεπερασμένα bytes (μόλις τέσσερα) και ως εκ τούτου όχι μόνον άρρητοι στρογγυλοποιούνται, αλλά ακόμη και ρητοί με πεπερασμένο πλήθος ψηφίων είναι δυνατόν να στρογγυλοποιηθούν, λόγω της μετατροπής τους στο δυαδικό σύστημα με άπειρο πλήθος ψηφίων (π.χ. το 0.3). Τα σφάλματα που υπεισέρχονται στους υπολογισμούς είναι δυνατόν να μας οδηγήσουν σε εσφαλμένα συμπεράσματα, αν δε δώσουμε τη δέουσα προσοχή. Για να δείξουμε το μέγεθος του σφάλματος που είναι δυνατόν να κάνουμε, δίνουμε το επόμενο παράδειγμα.

Παράδειγμα 1.2 *Να λύσετε την εξίσωση $1.00000x^2 - 111.121x - 1.21690 = 0$, χρησιμοποιώντας αριθμητική 6 σ.ψ.. Να βρεθεί το σχετικό σφάλμα που γίνεται. Να βελτιώσετε τη λύση σας και να δώσετε μια αξιόπιστη λύση με την παραπάνω αριθμητική. Δίνεται ότι οι ακριβείς λύσεις της εξίσωσης είναι $x_1 = 111.132$ και $x_2 = -0.01095$.*

Λύση Είναι γνωστό ότι οι ρίζες του τριωνύμου δίνονται από τον τύπο

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1.8}$$

Αναλυτικά έχουμε: $b^2 = 12350.3$, $4ac = -4.8676$, $b^2 - 4ac = 12355.2$, $\sqrt{b^2 - 4ac} = 111.154$, οπότε $x_1^* = 111.136$ και $x_2^* = -0.0165$. Για τη μεγάλη ρίζα το απόλυτο σχετικό σφάλμα είναι

$$|\delta| = \frac{|x_1^* - x_1|}{x_1} = 0.000036 = 0.0036\%$$

Για τη μικρή όμως ρίζα τα πράγματα δεν είναι καθόλου αξιόπιστα. Γι αυτή έχουμε το απόλυτο σχετικό σφάλμα να είναι

$$|\delta| = \frac{|x_2^* - x_2|}{x_2} = 0.506849 = 50.68\%$$

Ωστόσο, μπορούμε να διορθώσουμε το πρόβλημά μας, αν αντί του τύπου (1.8), χρησιμοποιήσουμε τον αντίστοιχο ισοδύναμο τύπο

$$x_2 = \frac{4ac}{2a(-b+\sqrt{b^2-4ac})} = \frac{2c}{(-b+\sqrt{b^2-4ac})}$$

Τώρα, χρησιμοποιώντας τον καινούργιο τύπο, βρίσκουμε $x_2^* = -0.0109495$. Το απόλυτο σχετικό σφάλμα πλέον είναι

$$|\delta| = \frac{|x_2^* - x_2|}{x_2} = 0.000046 = 0.0046\%$$

Παρατηρούμε ότι το σφάλμα είναι πλέον της ίδιας τάξης με εκείνο της μεγάλης ρίζας. Σε τέτοια φαινόμενα, όπως αυτό του σφάλματος του προηγούμενου παραδείγματος, καταλήγουμε, όταν είμαστε υποχρεωμένοι να δουλεύουμε με πεπερασμένο πλήθος σημαντικών ψηφίων και κατά τους υπολογισμούς μας αυτά αλληλοαναιρούνται, π.χ. αφαιρούνται δυο σχεδόν ίσοι αριθμοί ή διαιρείται κάποιος αριθμός με κάποιον άλλο πολύ μικρότερό του. Το πρόβλημα που δημιουργείται είναι γνωστό ως **απώλεια σ.ψ.** Περισσότερα παραδείγματα θα μπορούσε κάποιος να δει στο ([5]). Τα σ.ψ. είναι στενά συνδεδεμένα με την έννοια του σχετικού σφάλματος.

Θεώρημα 1.2.2 *Αν ο αριθμός x^* προσεγγίζει τον x σε k σ.ψ., τότε ισχύει*

$$|\delta| = \frac{|x^* - x|}{|x|} \lessapprox \frac{1}{2}10^{-k+1}$$

Απόδειξη: Αφού ο αριθμός είναι στρογγυλεμένος σε k σ.ψ. γράφεται ως

$$|x^*| = 0.a_1a_2\ldots a_k \cdot 10^m$$

Αφού είναι στρογγυλεμένος σε k σ.ψ., θα είναι και σε $(k-m)$ δ.ψ. Έτσι θα έχουμε

$$|\varepsilon| \le 0.5 \cdot 10^{-k+m}$$

οπότε

$$|\delta| = \frac{|\varepsilon|}{|x|} \approx \frac{|\varepsilon|}{|x^*|} \lessapprox \frac{0.5 \cdot 10^{-k+m}}{0.a_1 a_2 \ldots a_k \cdot 10^m} \leqq \frac{0.5}{0.1} \cdot 10^{-k} = 0.5 \cdot 10^{-k+1}$$

□

1.2.3 Σφάλματα και πράξεις

Υποθέτοντας ότι οι υπάρχουσες τιμές είναι προσεγγιστικές και κατά την εκτέλεση των πράξεων δεν υπεισέρχονται καινούργια σφάλματα στους υπολογισμούς, είναι δυνατόν, κάτω από κάποιες συνθήκες να προβλέψουμε το μέγεθος των σφαλμάτων που θα έχουμε στο τελικό αποτέλεσμα, αφού τα σφάλματα μέσα από τις πράξεις είναι δυνατόν να αλλάξουν, να μεγαλώσουν ή να μικρύνουν.

Θεώρημα 1.2.3 *Το απόλυτο μέγιστο σφάλμα του αθροίσματος ή της διαφοράς δυο αριθμών είναι ίσο με το άθροισμα των απολύτων σφαλμάτων αυτών.*

Απόδειξη: Αν x_1^* και x_2^* οι προσεγγιστικές τιμές των x_1 και x_2 αντίστοιχα, τότε έχουμε

$$|\varepsilon| = |(x_1^* \pm x_2^*) - (x_1 \pm x_2)| = |(x_1^* - x_1) \pm (x_2^* - x_2)| = |\varepsilon_1 \pm \varepsilon_2| \leq |\varepsilon_1| + |\varepsilon_2|$$

οπότε η μέγιστη τιμή του $|\varepsilon| = |\varepsilon_1| + |\varepsilon_2|$. □

Θεώρημα 1.2.4 *Το σφάλμα του γινομένου δύο αριθμών είναι περίπου ίσο με το άθροισμα των γινομένων των σφαλμάτων με τις αντίστοιχες προσεγγιστικές τιμές αυτών με αντίστροφη σειρά.*

Απόδειξη: Αν x_1^* και x_2^* οι προσεγγιστικές τιμές των x_1 και x_2 αντίστοιχα, τότε έχουμε

$$\varepsilon = x_1^* \cdot x_2^* - x_1 \cdot x_2 = x_1^* \cdot x_2^* - x_1^* \cdot x_2 + x_1^* \cdot x_2 - x_1 \cdot x_2 =$$
$$x_1^*(x_2^* - x_2) + x_2(x_1^* - x_1) = x_1^* \varepsilon_1 + x_2 \varepsilon_2 \approx x_1^* \varepsilon_2 + x_2^* \varepsilon_1.$$

□

Φανερά η μεγίστη τιμή του απολύτου σφάλματος μεγαλώνει, αν οι τιμές στις οποίες υπεισέρχεται είναι μεγάλες, ενώ αντίθετα μικραίνει, αν οι τιμές στις οποίες υπεισέρχεται είναι μικρές.

Θεώρημα 1.2.5 *Το μέγιστο απόλυτο σχετικό σφάλμα του γινομένου δύο αριθμών είναι κατά προσέγγιση ίσο με το άθροισμα των απόλυτων σχετικών σφαλμάτων των δυο αριθμών.*

Απόδειξη: Αν x_1^* και x_2^* οι προσεγγιστικές τιμές των x_1 και x_2 αντίστοιχα, τότε από το προηγούμενο Θεώρημα έχουμε

$$\varepsilon \approx x_1^*\varepsilon_2 + x_2^*\varepsilon_1$$

οπότε

$$|\delta| \approx |\frac{\varepsilon}{x_1^* x_2^*}| \approx |\frac{x_1^*\varepsilon_2 + x_2^*\varepsilon_1}{x_1^* x_2^*}| = |\delta_1 + \delta_2| \leq |\delta_1| + |\delta_2|$$

έτσι η μέγιστη τιμή του $|\delta| = |\delta_1| + |\delta_2|$. □

Παράδειγμα 1.3 *Οι τιμές $x_1^* = 0.0231$ και $x_2^* = -0.0123$ είναι προσεγγιστικές. Να βρεθεί το μέγιστο απόλυτο σφάλμα για την ποσότητα $A = 5.25x_1 - 3.05x_2$. Τι τάξης είναι η ακρίβεια;*

Λύση Αφού οι τιμές είναι προσεγγιστικές, για τα απόλυτα μέγιστα σφάλματα θα ισχύει

$$|\varepsilon_1| \leq 0.5 \cdot 10^{-4} \text{ και } |\varepsilon_2| \leq 0.5 \cdot 10^{-4}$$

Για την παράστασή μας θα ισχύει

$$|\varepsilon| = |5.25x_1^* - 3.05x_2^* - (5.25x_1 - 3.05x_2)| = |5.25\varepsilon_1 - 3.05\varepsilon_2| \leq 5.25|\varepsilon_1| + 3.05|\varepsilon_2|$$

οπότε

$$|\varepsilon| \leq 0.5 \cdot 10^{-4}(5.25 + 3.05) = 4.15 \cdot 10^{-4} = 0.415 \cdot 10^{-3}$$

Επειδή $0.415 \cdot 10^{-3} \leq 0.5 \cdot 10^{-3}$, η ακρίβεια θα είναι της τάξης του $3^{ου}$ δ.ψ.

Παράδειγμα 1.4 *Οι τιμές $x_1^* = 73.25$ και $x_2^* = -0.02432$ είναι προσεγγιστικές, στρογγυλεμένες σε τέσσερα σημαντικά ψηφία. Να βρεθεί το αποτέλεσμα των πράξεων $x_1^* \cdot x_2^*$ στρογγυλεμένο στο πλήθος των ακριβών σημαντικών ψηφίων.*

Λύση Για τις δοσμένες τιμές έχουμε

$$|\varepsilon_1| \leq 0.5 \cdot 10^{-2} \text{ και } |\varepsilon_2| \leq 0.5 \cdot 10^{-5}$$

Από το Θεώρημα (1.2.3) έχουμε

$$|\varepsilon| \lessapprox |x_2^*||\varepsilon_1| + |x_1^*||\varepsilon_2| \leq 0.02432 \cdot 0.5 \cdot 10^{-2} + 73.25 \cdot 0.5 \cdot 10^{-5} = 0.48785 \cdot 10^{-3}$$

Συνεπώς, επειδή $0.48785 \cdot 10^{-3} \leq 0.5 \cdot 10^{-3}$, το αποτέλεσμα -1.78144 είναι ακριβές σε 3 δ.ψ. και επομένως σε 4 σ.ψ. δηλαδή $x_1 x_2 \approx -1.781$.

1.3 Σχήμα του Horner

Το σχήμα του Horner είναι γνωστό από το Λύκειο. Χρησιμοποιείται για να βρούμε την τιμή $P(x_0)$ ενός Πολυωνύμου $P(x)$ στο σημείο x_0 με τον πλέον οικονομικό τρόπο. Επιπλέον είναι ένας αλγόριθμος, που μας επιτρέπει να βρούμε το πηλίκο $Q(x)$ της διαίρεσης του $P(x)$ με το διώνυμο $(x - x_0)$.
Αν $P(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$ και $Q(x) = b_{n-1}x^{n-1} + b_{n-2}x^{n-2} + \cdots + b_1 x + b_0$ είναι το πηλίκο $Q(x)$ της διαίρεσης του $P(x)$ με το διώνυμο $(x - x_0)$, τότε ισχύει

$$a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 = (x - x_0)(b_{n-1}x^{n-1} + b_{n-2}x^{n-2} + \cdots + b_1 x + b_0) + P(x_0) \tag{1.9}$$

Εκτελώντας τις πράξεις στο δεύτερο μέλος της (1.9) και εξισώνοντας τους συντελεστές των ομοιόβαθμων όρων προκύπτουν οι σχέσεις

$$\begin{aligned} a_n &= b_{n-1}, \\ a_{k-1} &= b_{k-2} - x_0 b_{k-1}, \quad k = n(-1)2 \ \text{ και} \\ a_0 &= P(x_0) - x_0 b_0 \end{aligned} \tag{1.10}$$

Αναδιατάσσοντας τις σχέσεις (1.10) μπορούμε να προτείνουμε το σχήμα της σχέσης (1.11), το οποίο είναι γνωστό ως σχήμα Horner.

$$\begin{tikzcd}
 & a_n \arrow[dd] & a_{n-1} \arrow[d, dash, "+"'] & a_{n-2} \arrow[d, dash, "+"'] & \cdots & a_1 \arrow[d, dash, "+"'] & a_0 \arrow[d, dash, "+"'] \\
x_0 & & x_0 b_{n-1} \arrow[d, "="'] & x_0 b_{n-2} \arrow[d, "="'] & \cdots & x_0 b_1 \arrow[d, "="'] & x_0 b_0 \arrow[d, "="'] \\
 & b_{n-1} \arrow[ur, "\cdot x_0"] & b_{n-2} \arrow[ur, "\cdot x_0"] & b_{n-3} & \cdots \arrow[ur, "\cdot x_0"] & b_0 \arrow[ur, "\cdot x_0"] & P(x_0)
\end{tikzcd} \tag{1.11}$$

Με το σχήμα του Horner εκτός από την τιμή του πολυωνύμου στο σημείο x_0, μπορούμε να υπολογίσουμε και τις τιμές των παραγώγων του στο ίδιο σημείο, εφαρμόζοντάς το διαδοχικά στα πηλίκα που βρίσκουμε. Ο γενικός τύπος που ισχύει και η απόδειξή του αφήνεται ως άσκηση είναι

$$P^{(k)}(x_0) = k!\upsilon_k, \quad k = 1(1)n, \tag{1.12}$$

όπου το υ_k είναι το υπόλοιπο της διαίρεσης του k πηλίκου με το $(x - x_0)$.

Παράδειγμα 1.5 *Να βρεθεί η τιμή του πολυωνύμου $P(x) = x^4 - 5x^3 + 4x^2 + 14x - 23$ στο σημείο $x_0 = 2$ καθώς και όλων των παραγώγων του στο ίδιο σημείο.*

Λύση Έχοντας υπόψη μας το σχήμα (1.11), μπορούμε να έχουμε την παρακάτω διάταξη

	1	-5	$+4$	14	-23
2		$+2$	-6	-4	$+20$
	1	-3	-2	10	$-3 = P(2)$
2		$+2$	-2	-8	
	1	-1	-4	$+2 = \upsilon_1$	
2		$+2$	$+2$		
	1	$+1$	$-2 = \upsilon_2$		
2		$+2$			
	$1 = \upsilon_4$	$+3 = \upsilon_3$			

Λαμβάνοντας υπόψη μας τη σχέση (1.12), βρίσκουμε

$$P'(2) = 1!2 = 2, \;\; P''(2) = 2!(-2) = -4, \;\; P'''(2) = 3!3 = 18, \;\; P^{(4)}(2) = 4!1 = 24$$

1.4 Το διώνυμο του Newton

Το διώνυμο του Newton είναι γνωστό από το Γυμνάσιο. Ίσως όχι στη γενική του μορφή, αλλά είναι γνωστό. Για παράδειγμα όλοι θυμούνται την ταυτότητα $(a + b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$. Γενικά έχουμε ότι

Θεώρημα 1.4.1 *Για κάθε a και $b \in \mathbb{R}$ και i και $n \in \mathbb{N}$, ισχύει*

$$(a + b)^n = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} a^{n-i} b^i \tag{1.13}$$

Η απόδειξη θα γίνει επαγωγικά. Όμως πριν θα αποδείξουμε το επόμενο λήμμα.

Λήμμα 1.4.2 *Για τους συνδυασμούς των n ανα k και των n ανα $k-1$ πραγμάτων, ισχύει*

$$\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1} = \binom{n+1}{k} \tag{1.14}$$

Απόδειξη: Από το Λύκειο είναι γνωστό ότι $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ οπότε έχουμε

$$\begin{aligned}
\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1} &= \frac{n!}{k!(n-k)!} + \frac{n!}{(k-1)!(n-k+1)!} \\
&= \frac{n!(n-k+1)}{k!(n-k+1)!} + \frac{n!k}{(k)!(n-k+1)!} \\
&= \frac{n!(n-k+1+k)}{k!(n+1-k)!} \\
&= \binom{n+1}{k}
\end{aligned}$$

□

Απόδειξη του Θεωρήματος 1.4.1: Για $n = 1$ η ισότητα είναι προφανής. Δεχόμενοι ως ορθή την ισότητα 1.13 και πολλαπλασιάζοντας και τα δυο μέλη της με $(a+b)$ προκύπτει:

$$\begin{aligned}
(a+b)^{n+1} &= (a+b)\sum_{i=0}^{n}\binom{n}{i}a^{n-i}b^i \\
&= \sum_{i=0}^{n}\binom{n}{i}a^{n+1-i}b^i + \sum_{i=0}^{n}\binom{n}{i}a^{n-i}b^{i+1} \\
&= a^{n+1} + \sum_{i=1}^{n}\binom{n}{i}a^{n+1-i}b^i + \sum_{i=0}^{n-1}\binom{n}{i}a^{n-i}b^{i+1} + b^{n+1} \\
&= a^{n+1} + \sum_{i=1}^{n}\binom{n}{i}a^{n+1-i}b^i + \sum_{i=1}^{n}\binom{n}{i-1}a^{n+1-i}b^i + b^{n+1}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \binom{n+1}{0}a^{n+1} + \sum_{i=1}^{n}\left[\binom{n}{i} + \binom{n}{i-1}\right]a^{n+1-i}b^{i} + \binom{n+1}{n+1}b^{n+1} \\
&= \binom{n+1}{0}a^{n+1} + \sum_{i=1}^{n}\binom{n+1}{i}a^{n+1-i}b^{i} + \binom{n+1}{n+1}b^{n+1} \\
&= \sum_{i=0}^{n+1}\binom{n+1}{i}a^{n+1-i}b^{i}
\end{aligned}
$$

□

Επιπλέον το λήμμα 2.3.1 μας αποδεικνύει τη στενή σχέση που έχουν οι συντελεστές του ενός διωνύμου με τους στελεστές του επόμενου. Μάλιστα, τοποθετούμενοι κατάλληλα, δημιουργούν ένα τρίγωνο γνωστό ως τρίγωνο του Pascal, το οποίο φαίνεται στον επόμενο πίνακα μέχρι του $n = 5$.

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
 & & & & & 1 & & & & & \\
 & & & & 1 & & 1 & & & & \\
 & & & & & + & & & & & \\
 & & & 1 & & 2 & & 1 & & & \\
 & & & & + & & + & & & & \\
 & & 1 & & 3 & & 3 & & 1 & & \\
 & & & + & & + & & + & & & \\
 & 1 & & 4 & & 6 & & 4 & & 1 & \\
 & & + & & + & & + & & + & & \\
1 & & 5 & & 10 & & 10 & & 5 & & 1
\end{array}
$$

1.5 Πεπερασμένες διαφορές

Ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο στους επιστημονικούς υπολογισμούς παίζουν οι πεπερασμένες διαφορές. Χρησιμοποιούνται για να προσεγγίσουμε το συνεχές πρόβλημα με διακριτό (π.χ. διαφορικές εξισώσεις), αλλά και για να δώσουμε συνεχή έκφραση σε διακριτά δεδομένα (π.χ. παρεμβολή). Θεωρούμε έναν πίνακα τιμών (π.χ. των (x_i, y_i), όπου το i διατρέχει ένα πλήθος συνεχόμενων ακεραίων αριθμών). Από αυτόν τον πίνακα τιμών μπορούμε να δημιουργήσουμε μια στήλη πίνακα διαφορών, τις οποίες θα ονομάσουμε διαφορές πρώτης τάξης, αφαιρώντας από κάθε τιμή την προηγούμενή της. Επίσης μπορούμε να δημιουργήσουμε μια καινούργια στήλη διαφορών, τις οποίες θα ονομάσουμε διαφορές δεύτερης τάξης, αφαιρώντας από την τιμή κάθε διαφοράς την προηγούμενή της. Συνεχίζοντας μπορούμε να δημιουργήσουμε τις διαφορές τρίτης τάξης κ.ο.κ.. Μ' αυτόν τον τρόπο δημιουργούμε έναν πίνακα, που λέγεται πίνακας διαφορών. Φυσικά το βάθος μιας τέτοιας διαδικασίας εξαρτάται άμεσα από το πλήθος των τιμών και αν n είναι οι τιμές, οι διαφορές μπορούν να φτάσουν μέχρι $n-1$ τάξης. Για να σκιαγραφήσουμε τα παραπάνω δημιουργούμε τον επόμενο πίνακα διαφορών.

x_i	y_i	$1^{ης}$	$2^{ης}$	$3^{ης}$	$4^{ης}$	$5^{ης}$
-0.5	2.125					
		-0.475				
-0.25	1.650		-1.06			
		-1.535		1.4		
0	0.125		0.28		-1.56	
		-1.255		-0.22		1.19
0.25	-0.130		0.06		-0.37	
		-1.475		-0.59		
0.5	-1.345		-0.53			
		-2.005				
0.72	-1.875					

(1.15)

Ανάλογα με τον τρόπο που διαβάζουμε τον πίνακα διαφορών, τις διαφορές μπορούμε να τις διακρίνουμε σε τρεις κατηγορίες: τις προς τα εμπρός διαφορές, τις προς τα πίσω διαφορές και τις κεντρικές διαφορές.

Προς τα εμπρός διαφορές

Οι προς τα εμπρός διαφορές της $(n)-$θέσης είναι η διαφορά της $(n+1)-$θέσης μείον την $(n)-$θέση και συμβολίζονται με $\triangle$. Δηλαδή οι διαφορές πρώτης τάξης είναι $\triangle f_n = f_{n+1} - f_n$.[1] Κατ' επέκταση οι διαφορές δεύτερης τάξης είναι $\triangle(\triangle f_n) = \triangle^2 f_n = \triangle f_{n+1} - \triangle f_n$, της τρίτης τάξης είναι $\triangle(\triangle^2 f_n) = \triangle^3 f_n = \triangle^2 f_{n+1} - \triangle^2 f_n$ κ.ο.κ.. Εύκολα μπορεί κάποιος να παρατηρήσει ότι

$$\triangle^2 f_n = \triangle f_{n+1} - \triangle f_n = f_{n+2} - f_{n+1} - (f_{n+1} - f_n) = f_{n+2} - 2f_{n+1} + f_n$$

$$\triangle^3 f_n = \triangle^2 f_{n+1} - \triangle^2 f_n = f_{n+3} - 2f_{n+2} + f_{n+1} -$$

$$(f_{n+2} - 2f_{n+1} + f_n) = f_{n+3} - 3f_{n+2} + 3f_{n+1} - f_n$$

[1] Με το σύμβολο f_n συμβολίζουμε την τιμή $f(x_n)$ της συνάρτησης f

Επίσης μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι τελικά οι συντελεστές ακολουθούν το τρίγωνο του Pascal με εναλλασσόμενα πρόσημα. Στο επόμενο κεφάλαιο θα αποδειχτεί ο γενικός τύπος των προς τα εμπρός διαφορών.
Στον επόμενο πίνακα φαίνονται σχηματικά οι προς τα εμπρός διαφορές

x_i	y_i	$1^{\eta\varsigma}$	$2^{\eta\varsigma}$	$3^{\eta\varsigma}$	$4^{\eta\varsigma}$	$5^{\eta\varsigma}$
x_{k-2}	f_{k-2}					
		$\triangle f_{k-2}$				
x_{k-1}	f_{k-1}		$\triangle^2 f_{k-2}$			
		$\triangle f_{k-1}$		$\triangle^3 f_{k-2}$		
x_k	f_k		$\triangle^2 f_{k-1}$		$\triangle^4 f_{k-2}$	
		$\triangle f_k$		$\triangle^3 f_{k-1}$		$\triangle^5 f_{k-2}$
x_{k+1}	f_{k+1}		$\triangle^2 f_k$		$\triangle^4 f_{k-1}$	
		$\triangle f_{k+1}$		$\triangle^3 f_k$		
x_{k+2}	f_{k+2}		$\triangle^2 f_{k+1}$			
		$\triangle f_{k+2}$				
x_{k+3}	f_{k+3}					

Προς τα πίσω διαφορές

Οι προς τα πίσω διαφορές της $(n)-$θέσης είναι η διαφορά της $(n)-$θέσης μείον την $(n-1)-$θέση και συμβολίζονται με ∇. Δηλαδή οι διαφορές πρώτης τάξης είναι $\nabla f_n = f_n - f_{n-1}$. Επίσης της δεύτερης τάξης είναι $\nabla(\nabla f_n) = \nabla^2 f_n = \nabla f_{n+1} - \nabla f_n$, της τρίτης τάξης είναι $\nabla^3 f_n = \nabla(\nabla^2 f_n) = \nabla^2 f_{n+1} - \nabla^2 f_n$ κ.ο.κ..
Μπορεί κάποιος να παρατηρήσει ότι

$$\nabla^2 f_n = \nabla f_n - \nabla f_{n-1} = f_n - f_{n-1} - (f_{n-1} - f_{n-2}) = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}$$

$$\nabla^3 f_n = \nabla^2 f_n - \nabla^2 f_{n-1} = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2} -$$

$$(f_{n-1} - 2f_{n-2} + f_{n-3}) = f_n - 3f_{n-1} + 3f_{n-2} - f_{n-3}$$

Οι προς τα πίσω διαφορές φαίνονται σχηματικά στον επόμενο πίνακα.

$$
\begin{array}{ccccccc}
x_i & y_i & 1^{\eta\varsigma} & 2^{\eta\varsigma} & 3^{\eta\varsigma} & 4^{\eta\varsigma} & 5^{\eta\varsigma} \\
x_{k-2} & f_{k-2} & & & & & \\
 & & \nabla f_{k-1} & & & & \\
x_{k-1} & f_{k-1} & & \nabla^2 f_k & & & \\
 & & \nabla f_k & & \nabla^3 f_{k+1} & & \\
x_k & f_k & & \nabla^2 f_{k+1} & & \nabla^4 f_{k+2} & \\
 & & \nabla f_{k+1} & & \nabla^3 f_{k+2} & & \nabla^5 f_{k+3} \\
x_{k+1} & f_{k+1} & & \nabla^2 f_{k+2} & & \nabla^4 f_{k+3} & \\
 & & \nabla f_{k+2} & & \nabla^3 f_{k+3} & & \\
x_{k+2} & f_{k+2} & & \nabla^2 f_{k+3} & & & \\
 & & \nabla f_{k+3} & & & & \\
x_{k+3} & f_{k+3} & & & & &
\end{array}
$$

Κεντρικές διαφορές

Οι κεντρικές διαφορές ορίζονται σε δυο βήματα, της περιττής και της άρτιας τάξης. Αρχικά ορίζουμε τις διαφορές

$$\delta f_{n+\frac{1}{2}} = f_{n+1} - f_n$$

$$\delta^2 f_n = \delta f_{n+\frac{1}{2}} - \delta f_{n-\frac{1}{2}}$$

και στη συνέχεια, επαγωγικά, για $k = 1, 2, \ldots$ τις διαφορές μεγαλύτερης τάξης

$$\delta^{2k+1} f_{n+\frac{1}{2}} = \delta^{2k} f_{n+1} - \delta^{2k} f_n$$

$$\delta^{2k+2} f_n = \delta^{2k+1} f_{n+\frac{1}{2}} - \delta^{2k+1} f_{n-\frac{1}{2}}$$

Στον πίνακα που ακολουθεί φαίνεται, ίσως, και ο λόγος που ονομάστηκαν κεντρικές διαφορές.

$$
\begin{array}{cccccc}
x_i & y_i & 1^{\eta\varsigma} & 2^{\eta\varsigma} & 3^{\eta\varsigma} & 4^{\eta\varsigma} \\
x_{k-2} & f_{k-2} & & & & \\
 & & \longrightarrow \delta f_{n-\frac{3}{2}} & & & \\
x_{k-1} & f_{k-1} & \longrightarrow & \delta^2 f_{k-1} & & \\
 & & \longrightarrow \delta f_{n-\frac{1}{2}} & \longrightarrow & \delta^3 f_{n-\frac{1}{2}} & \\
x_k & f_k & \longrightarrow & \delta^2 f_k & \longrightarrow & \delta^4 f_k \\
 & & \longrightarrow \delta f_{n+\frac{1}{2}} & \longrightarrow & \delta^3 f_{k+\frac{1}{2}} & \\
x_{k+1} & f_{k+1} & \longrightarrow & \delta^2 f_{k+1} & & \\
 & & \longrightarrow \delta f_{n+\frac{3}{2}} & & & \\
x_{k+2} & f_{k+2} & & & &
\end{array}
$$

Ήδη έχουμε πει ότι ο πίνακας διαφορών είναι πάντα ο ίδιος, ο τρόπος με τον οποίο τον κοιτάζουμε αλλάζει. Έτσι ένα στοιχείο του πίνακα είναι δυνατόν να το δούμε ως προς τα εμπρός διαφορά κάποιας τάξης ή ως προς τα πίσω διαφορά ή ακόμη ως κεντρική διαφορά. Από τον επόμενο πίνακα θα μπορούσαμε να βρούμε σχέσεις μεταξύ τους.

$$
\begin{array}{cccccc}
x_i & y_i & 1^{\eta\varsigma} & 2^{\eta\varsigma} & 3^{\eta\varsigma} & 4^{\eta\varsigma} \\
x_{k-2} & f_{k-2} & & & & \\
 & & X & & & \\
x_{k-1} & f_{k-1} & & X & & \\
 & & X & & X & \\
x_k & f_k & & X & & X \\
 & & X & & X & \\
x_{k+1} & f_{k+1} & & \boxed{X} & & \\
 & & X & & & \\
x_{k+2} & f_{k+2} & & & &
\end{array}
$$

Για το $\textcircled{X}$ θα έχουμε

$$\triangle f_k = \nabla f_{k+1} = \delta f_{k+\frac{1}{2}}$$

Ενώ για το $\boxed{X}$ θα ισχύει

$$\triangle^2 f_k = \nabla^2 f_{k+2} = \delta^2 f_{k+1}$$

Γενικά θα μπορούσε κάποιος να δείξει ότι ισχύει

$$\triangle^m f_k = \nabla^m f_{k+m} = \delta^m f_{k+\frac{m}{2}}$$

Ειδικές περιπτώσεις

Ας δούμε τη συμπεριφορά ειδικών συναρτήσεων στις διαφορές. Η σταθερή συνάρτηση $f(x) = a$ αρχικά μας δίνει $\triangle(a) = a - a = 0$. Η συνάρτηση $f(x) = ax$ επίσης μας δίνει $\triangle(ax) = a(x+h) - ax = ah$, είναι δηλαδή σταθερή και ανεξάρτητη του x, αυτό έχει ως αποτέλεσμα όλες οι διαφορές μεγαλύτερης τάξης να είναι ίσες με μηδέν. Για τη συνάρτηση $f(x) = ax^2$ έχουμε αρχικά $\triangle(ax^2) = a(x+h)^2 - ax^2 = 2ahx + ah^2$, δηλαδή η διαφορά $1^{ης}$ τάξης είναι πολυώνυμο $1^{ου}$ βαθμού (ενός βαθμού μικρότερου του αρχικού) με συντελεστή μεγιστοβάθμιου όρου $2ah$ (a επί εκθέτη επί h). Ήδη έχουμε μιλήσει για τη γραμμικότητα του τελεστή $\triangle$, οπότε για τη διαφορά $2^{ης}$ τάξης και υπό την προϋπόθεση ότι οι τιμές ισαπέχουν, θα έχουμε $\triangle^2(ax^2) = \triangle(\triangle(ax^2)) = \triangle(2ahx + ah^2) = \triangle(2ahx) + \triangle(ah^2) = 2ah^2$. Παρατηρούμε ότι πάλι είναι σταθερή και ανεξάρτητη του x, που έχει ως αποτέλεσμα όλες οι διαφορές μεγαλύτερης τάξης να είναι ίσες με μηδέν. Υποθέτουμε ότι τα παραπάνω ισχύουν για όλες τις συναρτήσεις $f(x) = ax^m$, όπου $m = 1(1)n$, ότι δηλαδή η διαφορά $1^{ης}$ τάξης είναι πολυώνυμο $(m-1)$ βαθμού (ενός βαθμού μικρότερου του αρχικού) με συντελεστή μεγιστοβάθμιου όρου mah (a επί εκθέτη επί h) και η διαφορά m τάξης και υπό την προϋπόθεση ότι οι τιμές ισαπέχουν, είναι σταθερή και ανεξάρτητη του x και έχει ως αποτέλεσμα $\triangle^m(ax^m) = m!ah^m$. Θα αποδείξουμε τον ισχυρισμό για τη συνάρτηση $f(x) = ax^{n+1}$. Αρχικά, χρησιμοποιώντας τον τύπο του διωνύμου του Newton, βλέπουμε ότι

$$\triangle(ax^{n+1}) = a(x+h)^{n+1} - ax^{n+1} = (n+1)hx^n + P_{n-1}(x)$$

δηλαδή είναι πολυώνυμο n βαθμού (ενός βαθμού μικρότερου του αρχικού) με συντελεστή μεγιστοβάθμιου όρου $(n+1)ah$ (εκθέτη επί a επί h). Επίσης έχοντας υπόψη μας τη γραμμικότητα του τελεστή $\triangle$

$$\triangle^{n+1}(ax^{n+1}) = \triangle^n(\triangle(ax^{n+1})) = \triangle^n((n+1)hx^n + P_{n-1}(x)) =$$

$$(n+1)!ah^{n+1} + \underbrace{\triangle^n(P_{n-1}(x))}_{0}.$$

Φυσικά οι διαφορές υψηλότερης τάξης είναι όλες μηδέν. Έτσι αποδείξαμε ότι ισχύει το επόμενο Θεώρημα

Θεώρημα 1.5.1 *Έστω η συνάρτηση $f(x) = ax^n$, και $f_i = f(x_i)$ οι τιμές αυτής στα ισαπέχοντα σημεία x_i. Τότε η διαφορά 1ης τάξης είναι πολυώνυμο $n-1$ βαθμού (ενός βαθμού μικρότερου του αρχικού) με συντελεστή μεγιστοβάθμιου όρου $n \cdot a \cdot h$, η διαφορά n τάξης είναι σταθερή και ανεξάρτητη του x έχει ως αποτέλεσμα*

$$\triangle^n(ax^n) = n!ah^n$$

και οι διαφορές υψηλότερης τάξης είναι όλες μηδέν.

Παρατήρηση 1.5.1 *Από τη γραμμικότητα του τελεστή $\triangle$, το παραπάνω Θεώρημα ισχύει και για κάθε πολυώνυμο $P_n(x) = a_nx^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0$.*

Παράδειγμα 1.6 *Να γίνει ο πίνακας διαφορών του πολυωνύμου $P_3(x) = 2x^3 - 3x + 1$ στα σημεία $\{-0.5, 0, 0.5, 1, 1.5, 2\}$*

Λύση

x_i	y_i	$\triangle$	$\triangle^2$	$\triangle^3$	$\triangle^4$
$-0,5$	2.25				
		-1.25			
0	1		0		
		-1.25		1.5	
0.5	-0.25		1.5		0
		0.25		1.5	
1	0		3		0
		3.25		1.5	
1.5	3.25		4.5		
		7.75			
2	11				

Παρατηρούμε ότι πράγματι οι διαφορές τρίτης τάξης είναι σταθερές και οι διαφορές τέταρτης τάξης είναι πλέον μηδέν.

Ενδιαφέρον όμως παρουσιάζει και η μετάδοση των σφαλμάτων στις διαφορές. Αν υποθέσουμε, για παράδειγμα, ότι f_1^*, f_2^*, f_3^* είναι οι προσεγγιστικές τιμές των f_1, f_2, f_3 αντίστοιχα, τότε για τις διαφορές πρώτης τάξης έχουμε

$$\triangle f_1^* = f_2^* - f_1^* = f_2 + \varepsilon_2 - (f_1 + \varepsilon_1) = \triangle f_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1$$

οπότε παίρνουμε

$$|\triangle f_1^*| \leq \triangle f_1 + 2\varepsilon, \text{ όπου } \varepsilon = max\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|\}.$$

Επίσης για τις διαφορές δεύτερης τάξης έχουμε

$$\triangle^2 f_1^* = f_3^* - 2f_2^* + f_1^* = \triangle^2 f_1 + \varepsilon_3 - 2\varepsilon_2 + \varepsilon_1$$

οπότε πάλι βρίσκουμε

$$|\triangle^2 f_1^*| \leq \triangle^2 f_1 + 2^2\varepsilon, \text{ όπου } \varepsilon = max\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|, |\varepsilon_2|\}. \tag{1.16}$$

Γενικά τα σφάλματα μεταδιδόμενα, αυξάνουν πολύ γρήγορα στις διαφορές. Αν θεωρήσουμε ότι υπάρχει ένα μεμονωμένο σφάλμα στις τιμές μιας συνάρτησης, π.χ. στην τιμή f^* κάποιας θέσης του πίνακα, τότε μπορούμε να παρατηρήσουμε στο επόμενο πίνακα τη διάδοσή του

$$\begin{array}{c|ccccc}
f & & X & & X+\varepsilon \\
 & X & & X+\varepsilon & \\
f & & X+\varepsilon & & X-4\varepsilon \\
 & X+\varepsilon & & X-3\varepsilon & \\
f+\varepsilon & & X-2\varepsilon & & X+6\varepsilon \\
 & X-\varepsilon & & X+3\varepsilon & \\
f & & X+\varepsilon & & X-4\varepsilon \\
 & X & & X-\varepsilon & \\
f & & X & & X+\varepsilon
\end{array}$$

Με f έχουμε παραστήσει τις ακριβείς τιμές της συνάρτησης, ενώ με x τις ακριβείς τιμές των διαφορών. Παρατηρούμε ότι οι συντελεστές στα σφάλματα αυξάνουν πολλαπλασιαστικά (τουλάχιστον στο κέντρο του πίνακα) αλλά και σε «έκταση», ακολουθώντας το τρίγωνο του Pascal με εναλλασσόμενο πρόσημο.

Παράδειγμα 1.7 *Στον παρακάτω πίνακα τιμών ενός πολυωνύμου 2ου βαθμού υπάρχει ένα μεμονωμένο σφάλμα. Να εντοπίσετε το σφάλμα και το σημείο* x_0

στο οποίο αντιστοιχεί. Στη συνέχεια, αφού διορθωθεί ο πίνακας διαφορών, να γραφεί διορθωμένος.

x_i	-0.2	-0.1	0	0.1	0.2	0.3
f_i	0.814	0.9085	0.75	0.7285	0.714	0.7065

Λύση . Δημιουργούμε τον παρακάτω πίνακα διαφορών.

x_i	y_i	$\triangle$	$\triangle^2$	$\triangle^3$
-0.2	0.814			
		0.0945		
-0.1	0.9085		-0.253	
		-0.1585		0.39
0	0.75		0.137	
		-0.0215		-0.13
0.1	0.7285		0.007	
		-0.0145		0
0.2	0.714		0.007	
		-0.0075		
0.3	0.7065			

Αφού είναι τιμές πολυωνύμου $2^{ου}$ βαθμού, οι διαφορές $3^{ης}$ τάξης πρέπει να είναι μηδέν. Το μηδέν του πίνακα είναι αυτό που περιμένουμε, οι άλλες όμως τιμές προέρχονται από το σφάλμα που υπάρχει σε κάποια τιμή. Επειδή τα σφάλματα στις διαφορές ακολουθούν το τρίγωνο του Pascal, στην προκειμένη περίπτωση πρέπει να είναι από πάνω προς τα κάτω της μορφής ε, -3ε, 3ε, $-\varepsilon$. Έτσι έχουμε $-\varepsilon = -0.13$ ή $\varepsilon = 0.13$. Για να βρούμε το πού ακριβώς έχει γίνει το σφάλμα, ξεκινάμε από αυτήν την τιμή και πάμε διαγώνια πάνω αριστερά, όπου εντοπίζουμε την τιμή της f που έγινε το σφάλμα. Το σφάλμα λοιπόν έγινε στην τιμή 0.9085. Από τη σχέση (1.1) βρίσκουμε την ακριβή τιμή $f = f^* - \varepsilon = 0.9085 - 0.13 = 0.7785$. Εύκολα κάποιος μπορεί να επαληθεύσει το Θεώρημα (1.5.1), αφού κάνει τη διόρθωση.

Παράδειγμα 1.8 *Στον παρακάτω πίνακα τιμών ενός πολυωνύμου $3^{ου}$ βαθμού υπάρχει ένα μεμονωμένο σφάλμα. Να εντοπίσετε το σφάλμα και στη συνέχεια, αφού διορθωθεί ο πίνακας διαφορών, να γραφεί διορθωμένος.*

x_i	-0.8	-0.4	0	0.4	0.8	1.2	1.6	2
f_i	1.5384	0.9048	1.5	2.0952	1.4616	-1.6296	-8.4072	-20.1

Λύση . Δημιουργούμε τον παρακάτω πίνακα διαφορών.

x_i	y_i	$\triangle$	$\triangle^2$	$\triangle^3$	$\triangle^4$
-0.8	1.5384				
		-0.6336			
-0.4	0.9048		1.3488		
		0.7152		-1.5888	
0	1.62		-0.24		0.72
		0.4752		-0.8688	
0.4	2.0952		-1.1088		-0.48
		-0.6336		-1.3488	
0.8	1.4616		-2.4576		X
		-3.0912			
1.2	-1.6296				

Αφού είναι τιμές πολυωνύμου $3^{ου}$ βαθμού, οι διαφορές $4^{ης}$ τάξης πρέπει να είναι μηδέν. Ωστόσο οι τιμές του πίνακα δεν είναι αυτό που περιμένουμε. Επειδή τα σφάλματα στις διαφορές ακολουθούν το τρίγωνο του Pascal, στην προκειμένη περίπτωση πρέπει να είναι από πάνω προς τα κάτω της μορφής ε, -4ε, 6ε, -4ε, ε. Διαιρώντας τις δυο τιμές βρίσκουμε -1.5. Όμως, τόσο ακριβώς προκύπτει από τη διαίρεση $\frac{6\varepsilon}{-4\varepsilon}$. Συνεπώς, θα έχουμε $6\varepsilon = 0.72$ ή $\varepsilon = 0.12$ Για να βρούμε το πού ακριβώς έχει γίνει το σφάλμα, ξεκινάμε από την θέση που θα έπρεπε να βρίσκεται το $-\varepsilon$, που είναι εκείνη με το X και από αυτήν τη θέση πάμε διαγώνια πάνω αριστερά, όπου εντοπίζουμε την τιμή της f που έγινε το σφάλμα. Το σφάλμα λοιπόν έγινε στην τιμή 1.62. Από τη σχέση (1.1) βρίσκουμε την ακριβή τιμή $f = f^* - \varepsilon = 1.62 - 0.12 = 1.5$. Εύκολα κάποιος μπορεί να επαληθεύσει το Θεώρημα (1.5.1), αφού κάνει τη διόρθωση.

Ασκήσεις

Άσκηση 1.1 *Να προσεγγίσετε την e^x και $\ln x$ χρησιμοποιώντας τους τύπους του Taylor με τους τρεις πρώτους όρους και στη συνέχεια βρείτε την τάξη προσέγγισης για τη συνάρτηση $e^x \cdot \ln x$*

Άσκηση 1.2 *Αν είναι γνωστό ότι ή τιμή μιας ποσότητας βρίσκεται στο διάστημα $I = [122.757, 123.743]$, να βρεθεί η προσεγγιστική τιμή και το σχετικό σφάλμα.*

Άσκηση 1.3 *Το μέγιστο απόλυτο σχετικό σφάλμα του πηλίκου δυο αριθμών είναι κατά προσέγγιση ίσο με το άθροισμα των απόλυτων σχετικών σφαλμάτων των δυο αριθμών.*

Άσκηση 1.4 *Οι τιμές* $x_1^* = 53.23$ *και* $x_2^* = -0.02131$ *είναι προσεγγιστικές, στρογγυλεμένες σε τέσσερα σημαντικά ψηφία. Να βρεθεί το αποτέλεσμα των πράξεων* $0.05x_1^* - 6.2x_2^*$, *στρογγυλεμένο στο πλήθος των ακριβών σημαντικών ψηφίων.*

Άσκηση 1.5 *Να βρεθεί η τιμή του πολυωνύμου* $P(x) = -2x^5 - 3x^3 + 4x - 2$ *στο σημείο* $x_0 = -2$ *καθώς και όλων των παραγώγων του στο ίδιο σημείο.*

Άσκηση 1.6 *Να βρεθεί ένας αλγόριθμος παρόμοιος με εκείνον του Horner, που θα δίνει το υπόλοιπο και το πηλίκο της διαίρεσης του πολυωνύμου* $P(x)$ *με το τριώνυμο* $x^2 - ax - b$.

Άσκηση 1.7 *Να γενικευτεί ο τύπος (1.16) με επαγωγή ή με όποιον άλλο τρόπο μπορείτε.*

Άσκηση 1.8 *Αν οι τιμές μιας συνάρτησης είναι στρογγυλεμένες σε 6 δεκαδικά ψηφία, να δώσετε φράγματα ανοχής για τις διαφορές δεύτερης τάξης.*

Άσκηση 1.9 *Στον παρακάτω πίνακα τιμών ενός πολυωνύμου 3ου βαθμού υπάρχει ένα μεμονωμένο σφάλμα. Να εντοπίσετε το σφάλμα και στη συνέχεια, αφού διορθωθεί ο πίνακας διαφορών, να γραφεί διορθωμένος.*

x_i	-0.8	-0.4	0	0.4	0.8	1.2	1.6	2
f_i	1.5384	0.9048	1.5	2.08	1.4616	-1.6296	-8.4072	-20.1

Παρεμβολή

2.1 Η έννοια της παρεμβολής

Η έννοια της συνάρτησης είναι στενά συνυφασμένη με την έννοια του πίνακα τιμών και της γραφικής παράστασης. Ιδιαίτερα οι μαθητές και οι φοιτητές είναι εξοικειωμένοι με τις ανωτέρω έννοιες οι οποίες διδάσκονται, και μάλιστα πολύ σωστά, από τις «μικρές» τάξεις του Γυμνασίου. Για παράδειγμα, οι περισσότεροι φοιτητές, με την εμφάνιση του τύπου του υπολογισμού του διαστήματος στην ομαλά επιταχυνόμενη κίνηση $S(t) = \frac{1}{2}\gamma t^2 + v_0 t$, όπου το γ είναι η επιτάχυνση, το v_0 είναι η αρχική ταχύτητα και το t ο χρόνος, έχουν υπόψη τους και πολύ σωστά, μια παραβολή.

Στην πράξη όμως τα πράγματα δεν είναι πάντα έτσι. Στην πράξη πάρα πολλές φορές τα πράγματα είναι «ανάποδα», δηλαδή πρώτα έχουμε έναν πίνακα τιμών (συνήθως πειραματικά αποτελέσματα ή αποτελέσματα άλλων μετρήσεων), στη συνέχεια έχουμε ένα γράφημα του πίνακα τιμών, που με κόπο και προσπάθεια σχηματίσαμε και τέλος έναν τύπο μιας συνάρτησης, που πιθανόν να μας περιγράφει το φαινόμενο που μας έδωσε τα πειραματικά αποτελέσματα ή τα αποτελέσματα των μετρήσεων. Φυσικά κάτι τέτοιο είναι εξαιρετικά χρήσιμο, αφού η εύρεση τύπου θα μας επιτρέπει να βλέπουμε μεταξύ των παρατηρήσεων ή να προβλέπουμε πέρα απ' αυτές. Η εύρεση μιας τέτοιας συνάρτησης, δηλαδή ενός τύπου, που θα μας επιτρέπει να παρεμβάλλουμε (να εισάγουμε) κι άλλα σημεία ανάμεσα ή και πέρα από τα ήδη υπάρχοντα (του πίνακα των αποτελεσμάτων μας), λέγεται παρεμβολή.

Το πρόβλημα της δημιουργίας ενός τύπου από τον πίνακα τιμών έχει άπειρες λύσεις, δηλαδή μπορούμε να βρούμε άπειρους τύπους συναρτήσεων, που να έχουν ως πίνακα τιμών, τον πίνακα των αποτελεσμάτων μας. Το γεγονός αυτό κάνει το πρόβλημα εξαιρετικά δύσκολο και γι αυτό θέλει ιδιαίτερη προσοχή για την εκλογή του τύπου της συνάρτησής μας. Άλλες φορές πάλι, προσπαθώντας να δώσουμε μια έκφραση (έναν τύπο) για τα μεγέθη μας, καταλήγουμε σε εκφράσεις ιδιαίτερα πολύπλοκες και δύσχρηστες. Προσεγγίζουμε λοιπόν αυτές τις συναρτήσεις με πολυώνυμα, επειδή τα πολυώνυμα συμπεριφέρονται ιδιαίτερα καλά, αφού έχουν πολύ καλές ιδιότητες τόσο στην παραγώγιση, όσο και στην ολοκλήρωση.

Στη συνέχεια θα προσπαθήσουμε να δώσουμε λύση στο πρόβλημα της εύρεσης μιας συνάρτησης που έχει ως πίνακα τιμών τον πίνακα των παρατηρήσεών μας, με την επιπλέον συνθήκη ότι ο τύπος της συνάρτησής μας είναι ένα πολυώνυμο. Γενικά για τις συνεχείς συναρτήσεις ισχύει το επόμενο Θεώρημα ([2])

Θεώρημα 2.1.1 *(***Weierstrass***) Αν μια συνάρτηση f είναι συνεχής σ' ένα διάστημα $[a,b]$ τότε $\forall \varepsilon > 0$, υπάρχει ένα πολυώνυμο $P(x)$ έτσι ώστε $|P(x) - f(x)| < \varepsilon \ \ \forall x \in [a,b]$.*

2.2 Το πολυώνυμο του Lagrange

Αρχικά θα επιστρατεύσουμε τις γνώσεις μας από το Γυμνάσιο. Είναι γνωστό ότι από δυο σημεία τα (x_0, f_0) και (x_1, f_1) με $x_0 \neq x_1$ περνάει μια μοναδική ευθεία, π.χ. η $y = ax + b$. Η ευθεία αυτή προφανώς είναι ένα μοναδικό πολυώνυμο πρώτου βαθμού, το οποίο διέρχεται από τα δυο σημεία. Είναι προφανές ότι $f_0 = ax_0 + b$ και $f_1 = ax_1 + b$.

Την παραπάνω ιδέα θα προσπαθήσουμε να τη γενικεύσουμε. Θεωρούμε τώρα $n+1$ σημεία διαφορετικά μεταξύ τους, π.χ. τα

$$(x_i, f_i), \quad i = 0(1)n \ \text{ με } \ x_i \neq x_j \text{ για } \ i \neq j \tag{2.1}$$

Επίσης θεωρούμε το n–οστού βαθμού πολυώνυμο $P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_n x^n$, που διέρχεται από τα σημεία αυτά. Προφανώς ορίζονται οι παρακάτω σχέσεις:

$$\begin{array}{rcl} f_0 &=& a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_{n-1}x_0^{n-1} + a_n x_0^n \\ f_1 &=& a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_{n-1}x_1^{n-1} + a_n x_1^n \\ & \vdots & \\ f_n &=& a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_{n-1}x_n^{n-1} + a_n x_n^n \end{array} \tag{2.2}$$

Η λύση στο σύστημα (2.2) μας δίνει τους συντελεστές του πολυωνύμου. Στο σύστημα αυτό η ορίζουσα των συντελεστών των αγνώστων (άγνωστοι είναι οι συντελεστές του πολυωνύμου) είναι η ορίζουσα

$$D = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^{n-1} & x_0^n \\ & & \vdots & & \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^{n-1} & x_1^n \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^{n-1} & x_n^n \end{vmatrix} \tag{2.3}$$

Η ορίζουσα D είναι γνωστή ως ορίζουσα του Vandermonde και είναι γνωστό ότι η τιμή της δίνεται από τον τύπο

$$D = \prod_{\substack{i=0,\ j=0 \\ i>j}}^{n} (x_i - x_j)$$

Μια ωραία ιδέα για απόδειξη αυτής της σχέσης θα μπορούσε κάποιος να βρει στο βιβλίο του G. Strang [7]. Αφού λοιπόν η ορίζουσα αυτή είναι διαφορετική από το μηδέν (γιατί;), το σύστημα (2.2) έχει μοναδική λύση και επομένως το Πολυώνυμο $P_n(x)$ είναι μοναδικό. Έτσι αποδείξαμε το επόμενο Θεώρημα:

Θεώρημα 2.2.1 *Από $n+1$ σημεία με διαφορετικές μεταξύ τους τετμημένες περνάει ένα μοναδικό πολυώνυμο $P_n(x)$ βαθμού n.*

Παρατήρηση 2.2.1 *Πολυώνυμα βαθμού μικρότερου του n δεν μπορούν να ορισθούν πάντοτε, ενώ πολυώνυμα βαθμού μεγαλύτερου του n μπορούμε να βρούμε άπειρα, αφού κάθε πολυώνυμο της μορφής $Q(x) = P_n(x) + r(x)\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$ περνάει από τα σημεία (2.1).*

Παρατήρηση 2.2.2 *Αφού οι συντελεστές του πολυωνύμου εξαρτώνται από τη λύση του συστήματος (2.2), είναι πολύ πιθανό ο συντελεστής του μεγιστοβάθμιου όρου να είναι μηδέν ($a_n = 0$). Σ' αυτή την περίπτωση ο βαθμός του $P_n(x)$ θα είναι μικρότερος του n. Έτσι ορθότερο θα είναι, όταν μιλάμε για το πολυώνυμο παρεμβολής να λέμε το πολύ n βαθμού.*

Για την εύρεση αυτού του πολυωνύμου ο Lagrange πρότεινε την εξής ιδέα: Το πολυώνυμο $P_n(x)$ θα προκύπτει ως το άθροισμα $n+1$ πολυώνυμων βαθμού

n, της μορφής $f_i L_i(x),\ i = 0(1)n$, δηλαδή

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f_i. \tag{2.4}$$

Επιπλέον, για να περνάει το πολυώνυμο αυτό από τα $n+1$ σημεία, θα πρέπει τα πολυώνυμα $L_i(x)$ να πληρούν τις σχέσεις:

$$i)\ L_i(x_j) = 0,\ \forall j = 0(1)n \text{ με } j \neq i \text{ και } ii)\ L_i(x_i) = 1 \tag{2.5}$$

Η πρώτη από την (2.5) δείχνει ότι η μορφή όλων των πολυώνυμων $L_i(x),\ i = 0(1)n$ είναι

$$L_i(x) = A_i(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n) \tag{2.6}$$

ενώ η δεύτερη ότι οι συντελεστές A_i είναι

$$A_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)} \tag{2.7}$$

Αντικαθιστώντας τη (2.7) στη (2.6) και αυτή που θα βρούμε στη(2.4) παίρνουμε το πολυώνυμο του Langrange ήτοι:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)} f_i. \tag{2.8}$$

Υποθέτουμε τώρα ότι τα $n+1$ σημεία μας είναι σημεία μιας άγνωστης συνάρτησης f την οποία εμείς προσεγγίζουμε με το πολυώνυμο παρεμβολής του Lagrange. Σε κάθε σημείο x η τιμή του Πολυωνύμου $P_n(x)$ θα περιέχει μέσα της κάποιο σφάλμα που θα δίνεται από τη διαφορά $E(x) = f(x) - P_n(x)$. Στα σημεία $x_i,\ i = 0(1)n$ θα ισχύει $E(x_i) = 0,\ \forall i = 0(1)n$, δηλ. τα $x_i,\ i = 0(1)n$ είναι ρίζες του $E(x_i)$. Έτσι το $E(x)$ θα γράφεται

$$E(x) = A \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \tag{2.9}$$

Γενικότερα ισχύει το επόμενο Θεώρημα του οποίου την απόδειξη κάποιος μπορεί να βρει στα περισσότερα βιβλία Αριθμητικής Ανάλυσης π.χ. ([1], [3], [11], [6])

Θεώρημα 2.2.2 *Έστω μια συνάρτηση f, $n+1$ φορές παραγωγίσιμη σ' ένα διάστημα $[a,b]$ και $x_i \in [a,b], \forall i = 0(1)n$. Αν $P_n(x)$ το πολυώνυμο παρεμβολής του Lagrange στα παραπάνω σημεία, τότε για κάθε $x \in [a,b]$, υπάρχει κάποιο $\xi \in [a,b]$, έτσι ώστε*

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i) \tag{2.10}$$

Παρατήρηση 2.2.3 *A) Το διάστημα $[a,b]$ μπορούμε να το σχηματίσουμε, αν εκλέξουμε $a = \min\{x, x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ και $b = \max\{x, x_0, x_1, \ldots, x_n\}$. B) Το σημείο ξ στην πραγματικότητα είναι συνάρτηση του x δηλ. $\xi = \xi(x)$.*

Παράδειγμα 2.1 *Να βρεθεί το πολυώνυμο του Lagrange, που διέρχεται από τα σημεία*

$a)$

x	-1.1	0.5	1.2	2.7
y	1.5	2.2	1.4	3.7

$b)$

x	-1	0	1	2
y	5	0	-1	2

Λύση Αντικαθιστώντας στον τύπο (2.8) για την $a)$ περίπτωση έχουμε

$$\begin{aligned} P_3(x) &= 1.5\tfrac{(x-0.5)(x-1.2)(x-2.7)}{(-1.1-0.5)(-1.1-1.2)(-1.1-2.7)} \\ &\quad +2.2\tfrac{(x+1.1)(x-1.2)(x-2.7)}{(0.5+1.1)(0.5-1.2)(0.5-2.7)} \\ &\quad +1.4\tfrac{(x+1.1)(x-0.5)(x-2.7)}{(1.2+1.1)(1.2-0.5)(1.2-2.7)} \\ &\quad +3.7\tfrac{(x+1.1)(x-0.5)(x-1.2)}{(2.7+1.1)(2.7-0.5)(2.7-1.2)} \\ &= 2.68978 - 0.610958\,x - 0.987674\,x^2 + 0.500937\,x^3 \end{aligned}$$

ενώ για την περίπτωση $b)$ έχουμε

$$\begin{aligned} P_3(x) &= 5\tfrac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(-1-0)(-1-1)(-1-2)} \\ &\quad +0\tfrac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(0+1)(0-1)(0-2)} \\ &\quad -1\tfrac{(x+1)(x-0)(x-2)}{(1+1)(1-0)(1-2)} \\ &\quad +2\tfrac{(x+1)(x-0)(x-1)}{(2+1)(2-0)(2-1)} \\ &= -3\,x + 2\,x^2 \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι το πολυώνυμο αυτό, ενώ περιμέναμε να είναι $3^{ου}$ βαθμού, είναι $2^{ου}$ (παρατήρηση 2.2.2).

Παράδειγμα 2.2 *Να εκτιμήσετε το μέγιστο απόλυτο σφάλμα που κάνετε, όταν το* $\sqrt{0.63}$ *προσεγγίζεται, χρησιμοποιώντας το πολυώνυμο παρεμβολής της συνάρτησης* $f(x) = \sqrt{x}$ *στα σημεία* $x_0 = 0.36, x_1 = 0.49$ *και* $x_3 = 0.81$

Λύση Από τον τύπο του σφάλματος (2.10) έχουμε

$$\begin{aligned} |E(x)| &= \left|\frac{f'''(\xi(x))}{3!}(0.63 - 0.36)(0.63 - 0.49)(0.63 - 0.81)\right| \\ &= \left|\frac{1}{\sqrt{\xi(x)^5}}\right| \cdot \frac{3}{8} \cdot \frac{1}{6} \cdot 0.27 \cdot 0.14 \cdot 0.18 \\ &\leq 0.0055 \end{aligned}$$

αφού η συνάρτηση $x^{-\frac{5}{2}}$ είναι φθίνουσα στο διάστημα $[0.36, 0.81]$ και η μεγίστη τιμή που παίρνει είναι για $x = 0.36$.

2.3 Πολυώνυμο των Newton–Gregory

2.3.1 Με «προς τα εμπρός διαφορές»

Πολλές φορές τα σημεία στα οποία γίνεται η παρεμβολή ισαπέχουν, δηλαδή δυο διαδοχικά σημεία έχουν σταθερή διαφορά. Αν με h παραστήσουμε αυτή τη διαφορά και με I το υποσύνολο εκείνο των διαδοχικών ακέραιων αριθμών, που εκλέξαμε ως δείκτες στα σημεία μας, θα ισχύει $x_{i+1} - x_i = h, \ \ \forall i \in I$. Σ' αυτή την περίπτωση, αν με I_0 παριστάνουμε το προηγούμενο σύνολο I που περιέχει το 0, για τα σημεία x_i ισχύει

$$x_i = x_0 + ih, \quad \forall\, i \in I_0 \tag{2.11}$$

ενώ για οποιοδήποτε $x \in (x_0, x_1)$ έχουμε

$$x = x_0 + \theta h, \quad \text{με} \;\; \theta \in (0, 1) \tag{2.12}$$

Από τα Μαθηματικά του Λυκείου είναι γνωστή η εξίσωση της ευθείας που διέρχεται από δυο σημεία (x_0, f_0) και (x_1, f_1). Έτσι λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις

(2.11) και (2.12) έχουμε ότι για κάθε σημείο $(x, f(x))$ της ευθείας που διέρχεται από τα σημεία αυτά ισχύει

$$\begin{aligned} f(x) &= f_0 + \tfrac{x-x_0}{x_1-x_0}(f_1 - f_0) \\ &= f_0 + \tfrac{x-x_0}{x_1-x_0}\triangle f_0 \\ &= f_0 + \theta\triangle f_0 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Από την (2.9) για οποιοδήποτε σημείο εκτός της παραπάνω ευθείας θα ισχύει

$$f(x) = f_0 + \theta\triangle f_0 + A(x - x_0)(x - x_1) \tag{2.14}$$

Αν υποθέσουμε τώρα ότι έχουμε τρία ισαπέχοντα σημεία τα (x_0, f_0), (x_1, f_1) και (x_2, f_2), είναι φανερό ότι το πολυώνυμο της (2.14) περνά από τα δύο πρώτα. Απαιτώντας το πολυώνυμο αυτό να περνά και από το τρίτο, μπορούμε να εκλέξουμε το A. Πράγματι για $x = x_2$ έχουμε $\theta = 2$ και $f_2 = f_0 + 2\triangle f_0 + 2Ah^2$, οπότε λύνοντας προς A και αντικαθιστώντας (2.14) αυτή γίνεται

$$f(x) = f_0 + \theta\triangle f_0 + \frac{\theta(\theta - 1)}{2}\triangle^2 f_0 \tag{2.15}$$

Ο παραπάνω τύπος επαγωγικά γενικεύεται. Ωστόσο, πριν τον γενικεύσουμε, θα αποδείξουμε δυο λήμματα.

Λήμμα 2.3.1 *Για τους συνδυασμούς των n ανά k και των n ανά $k-1$ πραγμάτων, ισχύει*

$$\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1} = \binom{n+1}{k} \tag{2.16}$$

Απόδειξη: Από το Λύκειο είναι γνωστό ότι $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ οπότε έχουμε

$$\begin{aligned}
\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1} &= \frac{n!}{k!(n-k)!} + \frac{n!}{(k-1)!(n-k+1)!} \\
&= \frac{n!(n-k+1)}{k!(n-k+1)!} + \frac{n!k}{(k)!(n-k+1)!} \\
&= \frac{n!(n-k+1+k)}{k!(n+1-k)!} \\
&= \binom{n+1}{k}
\end{aligned}$$

□

Λήμμα 2.3.2 *Αν το x_0 και το x_k είναι σ' έναν πίνακα διαφορών, τότε ισχύει*

$$f_k = f_0 + \binom{k}{1}\triangle f_0 + \cdots + \binom{k}{k}\triangle^k f_0 \tag{2.17}$$

Απόδειξη: Για $k = 1$ η (2.17) είναι φανερό ότι ισχύει. Αν υποθέσουμε ότι ισχύει η (2.17), τότε λόγω της γραμμικότητας του τελεστή $\triangle$ θα ισχύει

$$\triangle f_k = \triangle f_0 + \binom{k}{1}\triangle^2 f_0 + \cdots + \binom{k}{k}\triangle^{k+1} f_0 \tag{2.18}$$

Προσθέτοντας κατά μέλη τις (2.17) και (2.18) και εφαρμόζοντας το λήμμα (2.3.1) για τους συντελεστές της ίδιας τάξης διαφορών, παίρνουμε

$$f_{k+1} = \triangle f_0 + \binom{k+1}{1}\triangle^2 f_0 + \cdots + \binom{k+1}{k+1}\triangle^{k+1} f_0$$

που δείχνει την εγκυρότητα του λήμματος. □

Ο τύπος των συνδυασμών έχει προφανώς έννοια για ακέραιους αριθμούς. Ωστόσο, πολλές φορές χρησιμοποιείται και για πραγματικούς, εκφράζοντας μόνον έναν αριθμό. Είναι δηλαδή μια συντομογραφία ενός πλήθους πράξεων. Έτσι ο τύπος

$$\binom{\theta}{n} = \frac{\theta(\theta-1)\cdots(\theta-k+1)}{k!}, \quad \theta \in \mathbb{R} \tag{2.19}$$

εκφράζει το αποτέλεσμα των παραπάνω πράξεων και τίποτε περισσότερο. Κατόπιν αυτού ο τύπος της (2.15) γράφεται

$$f(x) = f_0 + \binom{\theta}{1}\triangle f_0 + \binom{\theta}{2}\triangle^2 f_0 \tag{2.20}$$

Για κάθε άλλο σημείο ισχύει παρόμοια με τον τύπο (2.14) ότι

$$\begin{aligned} f(x) &= f_0 + \tbinom{\theta}{1}\triangle f_0 + \tbinom{\theta}{2}\triangle^2 f_0 + A(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \\ &= f_0 + \tbinom{\theta}{1}\triangle f_0 + \tbinom{\theta}{2}\triangle^2 f_0 + A\,h^3\theta(\theta-1)(\theta-2) \end{aligned} \tag{2.21}$$

Αν υποθέσουμε ότι οι παραπάνω τύποι ((2.20) και (2.21)) ισχύουν για k σημεία, τότε θα έχουμε

$$\begin{aligned} f(x) &= f_0 + \binom{\theta}{1}\triangle f_0 + \cdots + \binom{\theta}{k-1}\triangle^{k-1} f_0 \\ f(x) &= f_0 + \binom{\theta}{1}\triangle f_0 + \cdots + \binom{\theta}{k-1}\triangle^{k-1} f_0 \\ &\quad +A\,h^k\theta(\theta-1)\cdots(\theta-k+1) \end{aligned} \tag{2.22}$$

Αν λοιπόν απαιτήσουμε το πολυώνυμο να περνά από το $k{+}1$ σημείο (δηλαδή το x_k), τότε $f(x_k) = f_k$, και $\theta = k$. Επίσης η δεύτερη από τις (2.22) και το λήμμα (2.3.2) μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε το A και να βρούμε το πολυώνυμο των προς τα εμπρός διαφορών, που περνά από τα $k+1$ σημεία. Συνοψίζουμε όλα τα παραπάνω στο επόμενο Θεώρημα

Θεώρημα 2.3.3 *Το πολυώνυμο που περνά από $n+1$ ισαπέχοντα σημεία, τα $x_i, \quad i = 0(1)n$, με προς τα «εμπρός διαφορές» δίνεται από το τύπο*

$$P_n(x) = f_0 + \binom{\theta}{1}\triangle f_0 + \cdots + \binom{\theta}{n}\triangle^n f_0 \tag{2.23}$$

Παρατήρηση 2.3.1 *Είναι γνωστό ότι το πολυώνυμο n βαθμού που περνά από $n+1$ σημεία είναι μοναδικό. Έτσι το Θεώρημα (2.2.2) ισχύει και για το πολυώνυμο των προς τα «εμπρός διαφορών», αφού ουσιαστικά τα δυο αυτά πολυώνυμα ταυτίζονται.*

Παράδειγμα 2.3 *Να προσεγγίσετε τη συνάρτηση $f(x) = \cos x$ με ένα πολυώνυμο το πολύ $3^{ου}$ βαθμού στο διάστημα $[0, \pi]$ σε ισαπέχοντα σημεία. Να γίνει η γραφική παράσταση του πολυωνύμου και της συνάρτησης στο ίδιο σύστημα αξόνων, χρησιμοποιώντας την εντολή Plot της Mathematica.*

Λύση Αφού το πολυώνυμο θέλουμε να είναι το πολύ $3^{ου}$ βαθμού στο διάστημα $[0, \pi]$ σε ισαπέχοντα σημεία, θα εκλέξουμε ως σημεία τα $x_0 = 0, x_1 = \frac{\pi}{3}, x_2 = \frac{2\pi}{3}$ και $x_3 = \pi$. Είναι φανερό ότι το βήμα είναι $h = \frac{\pi}{3}$. Δημιουργούμε τον πίνακα διαφορών

$$
\begin{array}{c|c|ccc}
x & y & \triangle f & \triangle^2 f & \triangle^3 f \\
\hline
0 & 1 & & & \\
 & & -\frac{1}{2} & & \\
\frac{\pi}{3} & \frac{1}{2} & & -\frac{1}{2} & \\
 & & -1 & & 1 \\
\frac{2\pi}{3} & -\frac{1}{2} & & \frac{1}{2} & \\
 & & -\frac{1}{2} & & \\
\pi & -1 & & &
\end{array}
\tag{2.24}
$$

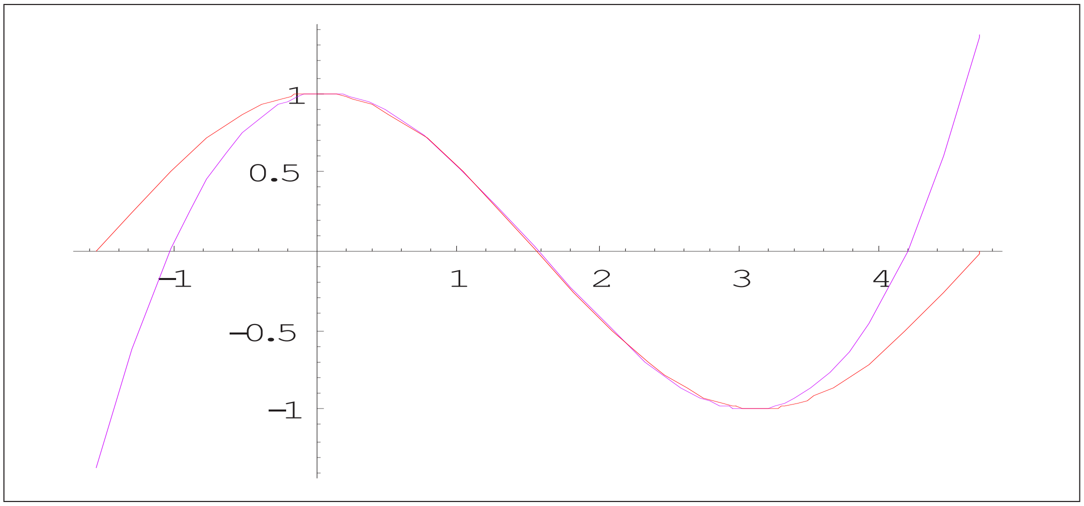
Χρησιμοποιώντας τον τύπο της (2.23) και τον προηγούμενο πίνακα παίρνουμε ότι

$$
\begin{aligned}
P_3(x(\theta)) &= 1 - \tfrac{1}{2}\theta - \tfrac{1}{2}\theta(\theta-1) + 1\theta(\theta-1)(\theta-2) \\
&= \tfrac{1}{2}\theta^3 - \tfrac{3}{4}\theta^2 + \tfrac{1}{12}\theta + 1
\end{aligned}
$$

όπου $x(\theta) = x_0 + \theta h$ και $\theta \in [0, 3]$. Αν θέσουμε στην παραπάνω σχέση $\theta = \frac{x - x_0}{h}$ και εκτελέσουμε τις πράξεις, προκύπτει το προσεγγιστικό πολυώνυμο του $\cos x$ ήτοι

$$
\cos x \approx \frac{9}{2\pi^3}x^3 - \frac{27}{4\pi^2}x^2 + \frac{1}{4\pi}x + 1
$$

στο Σχήμα (2.1) φαίνεται η πολύ καλή προσέγγιση που γίνεται στο $\cos x$ με το παραπάνω πολυώνυμο τρίτου βαθμού, στο διάστημα $[0, \pi]$. Παρατηρήστε πόσο γρήγορα στη συνέχεια χαλάει αυτή η προσέγγιση.



Σχήμα 2.1: Η γραφική παράσταση των δύο συναρτήσεων

2.3.2 Με «προς τα πίσω διαφορές»

Θεωρούμε πάλι $n+1$ ισαπέχοντα σημεία, τα $x_{-n}, x_{-n+1}, \ldots, x_{-1}, x_0$. Έστω $h = x_{-i+1} - x_{-i},\ i = 1(1)n$ η απόσταση μεταξύ τους και $\theta \in \mathbb{R}$. Τώρα θα ισχύει

$$x_{-i} = x_0 - ih, \quad \forall\, i \in I_0 \tag{2.25}$$

ενώ για οποιοδήποτε $x \in [x_0, x_{-n}]$ έχουμε

$$x = x_0 - \theta h, \quad \text{με} \quad \theta \in [0, n] \subset \mathbb{R} \tag{2.26}$$

Η εξίσωση της ευθείας που διέρχεται τώρα από τα δυο σημεία (x_0, f_0) και (x_{-1}, f_{-1}), λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (2.25) και (2.26) είναι

$$\begin{aligned} f(x) &= f_0 + \tfrac{x-x_0}{x_{-1}-x_0}(f_{-1} - f_0) \\ &= f_0 + \tfrac{-\theta h}{-h}(-\nabla f_0) \\ &= f_0 - \theta \nabla f_0 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Η θεωρία που αναπτύχθηκε στην προηγούμενη παράγραφο ισχύει αναλογικά και τώρα. Έτσι για παράδειγμα ισχύει το επόμενο λήμμα (η απόδειξη να γίνει από τον αναγνώστη).

Λήμμα 2.3.4 *Αν το x_0 και το x_{-k} είναι σ' έναν πίνακα διαφορών τότε ισχύει*

$$f_{-k} = f_0 - \binom{k}{1}\nabla f_0 + \cdots + (-1)^k \binom{k}{k}\nabla^k f_0 \tag{2.28}$$

Το επόμενο Θεώρημα (η απόδειξη να γίνει από τον αναγνώστη) μας δίνει τον τύπο της παρεμβολής με «προς τα πίσω διαφορές»

Θεώρημα 2.3.5 *Το πολυώνυμο, που περνά από $n+1$ ισαπέχοντα σημεία, τα x_{-i}, $i = 0(1)n$, με «προς τα πίσω διαφορές» δίνεται από τον τύπο*

$$P_n(x) = f_0 - \binom{\theta}{1}\nabla f_0 + \cdots + (-1)^k \binom{\theta}{n}\nabla^n f_0, \quad \text{με } \theta = \frac{x_0 - x}{h} \tag{2.29}$$

Αφού ήδη έχουμε πει ότι το πολυώνυμο (2.29) είναι μοναδικό, θα πρέπει να έχουμε υπόψη μας ότι, στην περίπτωση που η συνάρτηση προσεγγίζεται μέσα απ' αυτό, το σφάλμα θα είναι εκείνο της (2.10).

Στην πράξη, όταν έχουμε να βρούμε την προσεγγιστική τιμή μιας συνάρτησης από έναν πίνακα διαφορών σε ισαπέχοντα σημεία, πρέπει να αποφασίσουμε τι πολυώνυμο θα επιλέξουμε. Στην περίπτωση αυτή, εάν πρόκειται να χρησιμοποιήσουμε προς τα εμπρός διαφορές, ονομάζουμε x_0 το αμέσως μικρότερο σημείο του πίνακα, ενώ, εάν πρόκειται να χρησιμοποιήσουμε προς τα πίσω διαφορές, ονομάζουμε x_0 το αμέσως μεγαλύτερο σημείο του πίνακα και στις δυο περιπτώσεις το $\theta \in (0, 1)$. Σημειώνουμε ότι η επιλογή του πολυωνύμου δεν είναι πάντοτε εύκολη υπόθεση και ούτε παίρνουμε το καλύτερο πολυώνυμο παρεμβολής, αν χρησιμοποιήσουμε μεγαλύτερο πλήθος τιμών, παρόλο που μ' αυτόν τον τρόπο χρησιμοποιούμε περισσότερη πληροφορία. Η γραφική παράσταση των τιμών ίσως είναι δυνατόν να μας δώσει μια ένδειξη για το πολυώνυμο. Η προσεκτική παρατήρηση του πίνακα διαφορών και ο εντοπισμός της τάξης των διαφορών που είναι κοντά στο μηδέν δίνει μια άλλη ένδειξη.

Παράδειγμα 2.4 *Να βρεθεί η τιμή $f(0.7)$, αν είναι γνωστά τα εξής σημεία της συνάρτησης:* $(-0.5, 0.25), (0, 0.1), (0.5, 0.3)$ *και* $(1, 1.7)$.

Λύση Αφού $x = 0.7$, θεωρούμε ότι $x_0 = 1$. Τότε έχουμε ότι $\theta = \frac{1-0.7}{0.5} = 0.6$. Χρησιμοποιώντας τον τύπο (αφού τον αποδείξουμε!) $\nabla^k f_0 = \sum_{m=0}^{k} (-1)^m \binom{k}{m} f_{-m}$, θα πάρουμε $\nabla f_0 = -0.15, \nabla^2 f_0 = 0.35$ και $\nabla^3 f_0 = 0.8$. Οπότε ο τύπος (2.29) δίνει

$$
\begin{aligned}
f(0.7) &= 1.7 - 0.6 \cdot (-0.15) + 0.6 \cdot (-0.4) \cdot 0.35 - 0.6 \cdot (-0.4) \cdot (-1.4) \\
&= 1.946
\end{aligned}
$$

Παράδειγμα 2.5 *Θεωρούμε τον επόμενο πίνακα τιμών (και διαφορών).*

x	f	$\triangle f$	$\triangle^2 f$	$\triangle^3 f$	$\triangle^4 f$	$\triangle^5 f$	$\triangle^6 f$
-2	2.8						
		1.1					
-1.5	3.9		0.3				
		1.4		-0.2			
-1	5.3		0.1		0.06		
		1.5		-0.14		-0.13	
-0.5	6.8		-0.04		-0.07		0.24
		1.46		-0.21		0.11	
0	8.26		-0.25		0.04		-0.2
		1.21		-0.17		-0.09	
0.5	9.47		-0.42		-0.05		0.21
		0.79		-0.22		0.12	
1	10.26		-0.64		0.07		
		0.15		-0.15			
1.5	10.41		-0.79				
		-0.64					
2	9.77						

Να εκτιμηθούν οι τιμές της συνάρτησης f στα σημεία: $x = 0.2$ και $x = 1.3$

Λύση Παρατηρούμε ότι οι διαφορές τέταρτης τάξης είναι κοντά στο μηδέν, ενώ στη συνέχεια αρχίζουν και μεγαλώνουν. Έτσι φρόνιμο είναι να επιλέξουμε για παρεμβολή ένα πολυώνυμο τρίτου βαθμού. Σύμφωνα με αυτά που είπαμε παραπάνω, με $x_0 = 0$, $\theta = 0.4$ και τον τύπο των προς τα εμπρός διαφορών μπορούμε να βρούμε

$$
f(0.2) = 8.26 + 1.21 \cdot 0.4 - 0.42 \cdot \frac{0.4 \cdot (-0.6)}{2} - 0.22 \cdot \frac{0.4 \cdot (-0.6) \cdot (-1.6)}{6} = 8.7803
$$

Για την τιμή $f(1.3)$ οι προς τα εμπρός διαφορές δεν επαρκούν. Έτσι με προς τα πίσω διαφορές, $x_0 = 1.5$ και $\theta = 0.4$ θα έχουμε

$$f(1.3) = 10.41 - 0.15 \cdot 0.4 - 0.42 \cdot \frac{0.4 \cdot (-0.6)}{2} - 0.64 \cdot \frac{0.4 \cdot (-0.6) \cdot (-1.6)}{6} = 10.35944$$

Παράδειγμα 2.6 *Να βρεθεί το άθροισμα $S_3 = 1^3 + 2^3 + \cdots + n^3$. (Ομοίως τα αθροίσματα S_2 και S_1). [Θεωρήστε δεδομένο ότι τα αθροίσματα αυτά είναι πολυώνυμα].*

Λύση Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x) = 1^3 + 2^3 + \cdots + x^3$. Δημιουργούμε τον εξής πίνακα διαφορών

x	x^3	$f(x)$	$\triangle f$	$\triangle^2 f$	$\triangle^3 f$	$\triangle^4 f$	$\triangle^5 f$
1	1	1					
			8				
2	8	9		19			
			27		18		
3	27	36		37		6	
			64		24		0
4	64	100		61		6	
			125		30		0
5	125	225		91		6	
			216		36		
6	216	441		127			
			343				
7	343	784					

οπότε με προς τα εμπρός διαφορές, $x_0 = 1$ και $x = n$ δηλαδή $\theta = (n-1)$ παίρνουμε

$$\begin{aligned} f(n) = S_3 &= 1 + 8 \cdot (n-1) + 19\tfrac{(n-1)(n-2)}{2} \\ &\quad +18\tfrac{(n-1)(n-2)(n-3)}{6} + 6\tfrac{(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}{24} \\ &= \left(\tfrac{n(n+1)}{2}\right)^2 \end{aligned}$$

Ο αναγνώστης θα μπορούσε να δοκιμάσει να σχηματίσει τον παραπάνω τύπο παρατηρώντας ότι $S_3 = 0 + S_3$, δηλ. να δοκιμάσει να κάνει την παραπάνω διαδικασία με $x_0 = 0$ και $x = n$ δηλαδη $\theta = n$.

Το θέμα της παρεμβολής δεν εξαντλείται εδώ. Δεν εξαντλείται ούτε καν το θέμα της περεμβολής με πολυώνυμα. Για την ακρίβεια μόλις άνοιξε. Πολλές φορές ζητάμε η συνάρτηση που θέλουμε να περεμβάλουμε να έχει και τις ίδιες παραγώγους με το πολυώνυμό μας (θυμηθείτε το πολυώνυμο του Taylor), οπότε έχουμε περεμβολή με πολυώνυμα Hermite. Άλλες φορές πάλι η περεμβολή γίνεται γενικά με συναρτήσεις μιας ορισμένης μορφής στα διαστήματα μιας διαμέρισης, οπότε έχουμε παρεμβολή με Splines. Ωστόσο, πριν κλείσουμε το κεφάλαιο αυτό, θα πρέπει να αναφέρουμε ότι ο φοιτητής που ενδιαφέρεται θα μπορούσε να σχηματίσει μια πληρέστερη εικόνα στα βιβλία ([1], [3], [6]).

Ασκήσεις

Άσκηση 2.1 *Θεωρούμε τα σημεία $(x_0, c), (x_1, c), \dots, (x_n, c)$. Αν υποθέσουμε ότι αυτά είναι ισαπέχοντα, να δειχθεί ότι το πολυώνυμο παρεμβολής είναι μηδενικού βαθμού. Συμβαίνει το ίδιο και για μη ισαπέχοντα σημεία; Δοκιμάστε με Lagrange για $n = 2, 3$.*

Άσκηση 2.2 *Να βρεθεί η τιμή του a, ώστε το πολυώνυμο που ορίζεται από τα σημεία* $\begin{array}{c|cccc} x & x_0 & x_1 & x_2 & x_3 \\ \hline y & 4 & 2a & a^2 & a \end{array}$ *να είναι πολυώνυμο βαθμού μικρότερου του 3*

Άσκηση 2.3 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x) = x^3 - x^2 + 2x - 1$, η οποία έχει μια μοναδική ρίζα στο διάστημα $[0, 1]$ (γιατί;). Να εκτιμήσετε τη ρίζα αυτή α) προσεγγίζοντας τη συνάρτηση με πολυώνυμο $2^{ου}$ βαθμού. β) Γνωρίζοντας ότι η συνάρτηση αυτή αντιστρέφεται (γιατί;), να βρείτε το πολυώνυμο παρεμβολής $2^{ου}$ βαθμού της αντίστροφης αυτής και να εκτιμήσετε τη ρίζα.*

Άσκηση 2.4 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x) = \sin x$. Χρησιμοποιώντας τις τιμές της συνάρτησης στα σημεία $\{0, \frac{\pi}{6}$ και $\frac{\pi}{3}\}$, να γράψετε το πολυώνυμο παρεμβολής του Lagrange. Να χρησιμοποιήσετε το πολυώνυμο που βρήκατε για να εκτιμήσετε την τιμή $\sin\frac{\pi}{8}$. Βρείτε ένα φράγμα για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα και ένα για το μέγιστο απόλυτο σχετικό σφάλμα, που κάνετε, χρησιμοποιώντας τον τύπο του σφάλματος παρεμβολής.*
[Οι πράξεις σας να είναι απόλυτα ακριβείς χρησιμοποιώντας κλάσματα και ριζικά].

Άσκηση 2.5 *Να χρησιμοποιήσετε όλα τα δεδομένα, που προκύπτουν από τις τιμές της συνάρτησης* $f(x) = 0.8^x$ *στα σημεία* $x_k = -2 + k, \quad k = 0(1)4$ *και τον τύπο των προς τα εμπρός διαφορών Newton-Gregory, για να εκτιμήσετε την τιμή* $\sqrt[3]{0.8}$. *Βρείτε ένα φράγμα για το μέγιστο απόλυτο και ένα για το μέγιστο απόλυτο σχετικό σφάλμα, που κάνετε.*

Άσκηση 2.6 *Να υπολογιστεί το πολυώνυμο Lagrange* $P_2^L(x)$ *που παρεμβάλλει την συνάρτηση* $f(x) = cos(x)$ *στα σημεία* $0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{2}$. *Να συγκρίνετε τις τιμές της συνάρτησης και του πολυωνύμου παρεμβολής στα σημεία* $\frac{\pi}{4}$ *και* $\frac{\pi}{3}$. *Να βρεθεί ένα φράγμα για το μέγιστο απόλυτο σφάλμα.*

Αριθμητική Παραγώγιση

3.1 Γενικά

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε το πώς μπορούμε να δημιουργήσουμε μια συνάρτηση, που να πληρεί τις παρατηρήσεις μας γύρω από ένα μέγεθος. Όμως είναι γνωστή η αναγκαιότητα της γνώσης του ρυθμού μεταβολής ενός μεγέθους, δηλαδή της παραγώγου. Για την εύρεση της παραγώγου συχνά καταφεύγουμε στις αριθμητικές μεθόδους, ιδίως όταν δε γνωρίζουμε την αναλυτική έκφραση του τύπου της συνάρτησης. Ίσως θα πρέπει να ειπωθεί ότι και μερικές φορές, που είναι γνωστή η αναλυτική έκφραση της συνάρτησης, είναι προτιμότερο να χρησιμοποιούμε αριθμητικές μεθόδους, παρά αναλυτικές ([11]).

3.2 Τύποι και Σφάλματα από την παρεμβολή

3.2.1 Οι τύποι

Για την αριθμητική παραγώγιση της άγνωστης συνάρτησης f, χρησιμοποιούμε, για να την προσεγγίσουμε, τους τύπους της παρεμβολής που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Ιδιαίτερα, όταν τα σημεία είναι μη ισαπέχοντα, χρησιμοποιείται το πολυώνυμο του Lagrange (2.8). Η παράγωγος προκύπτει από την παραγώγιση του πολυωνύμου του Lagrange. Οι τύποι, που προκύπτουν, είναι μάλλον πολύπλοκοι. Έτσι έχουμε

$$f'(x) \approx (\sum_{i=0}^{n} L_i(x) f_i)' = (\sum_{i=0}^{n} L_i'(x) f_i) \tag{3.1}$$

όπου για την έκφραση του $L_i'(x)$ ισχύει

$$L_i'(x) = \frac{1}{\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(x_i - x_j)} \sum_{k=0}^{n} \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i,k}}^{n} (x - x_j) \tag{3.2}$$

Καλύτερα μάλλον είναι τα πράγματα, όταν χρησιμοποιούμε ισαπέχοντα σημεία. Στην περίπτωση αυτή από τον τύπο των προς τα εμπρός διαφορών (2.23), και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\frac{d\theta}{dx} = \frac{1}{h}$, έχουμε

$$f'(x) \approx \frac{d}{d\theta} P_n(x) \cdot \frac{d\theta}{dx} = \left(\frac{d}{d\theta} \binom{\theta}{1} \triangle f_0 + \cdots + \frac{d}{d\theta} \binom{\theta}{n} \triangle^n f_0 \right) \cdot \frac{1}{h} \tag{3.3}$$

Έτσι για $n = 1$ ή $n = 2$ έχουμε

$$\begin{aligned} f'(x) &\approx \frac{1}{h} \triangle f_0, \quad \text{για} \quad n = 1 \\ f'(x) &\approx \frac{1}{h}(\triangle f_0 + (\theta - \frac{1}{2}) \triangle^2 f_0), \quad \text{για} \quad n = 2 \end{aligned}$$

Θα πρέπει να παρατηρήσουμε ότι στα σημεία $x_i,\ i = 0(1)n$ είναι γνωστή μόνον η τιμή της συνάρτησης, όχι όμως και της παραγώγου. Έτσι για το σημείο x_i, έχουμε $\theta = i$, οπότε την τιμή της παραγώγου τη βρίσκουμε, αν θέσουμε στον τύπο (3.3), $\theta = i$. Ειδικά για $x_i = x_0$ έχουμε

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left(\triangle f_0 - \frac{1}{2} \triangle^2 f_0 + \cdots + (-1)^n \frac{1}{n} \triangle^n f_0 \right) \tag{3.4}$$

Ενώ για $n = 1$ ή $n = 2$ προκύπτει ότι

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h}(f_1 - f_0), \quad \text{για} \quad n = 1 \tag{3.5}$$

$$f'(x_0) \approx -\frac{1}{2h}(f_2 - 4f_1 + 3f_0), \ \text{για} \quad n = 2 \tag{3.6}$$

Παρόμοιοι τύποι προκύπτουν από τους τύπους των προς τα πίσω διαφορών. Έτσι από τον τύπο (2.29) προκύπτει

$$f'(x) \approx -\frac{1}{h} \frac{d}{d\theta} \left(-\binom{\theta}{1} \nabla f_0 + \cdots + (-1)^k \binom{\theta}{n} \nabla^n f_0 \right) \tag{3.7}$$

Οι υπόλοιποι τύποι των προς τα πίσω διαφορών αφήνονται ως ασκήσεις για τον αναγνώστη.

Παράδειγμα 3.1 *Οι μετρήσεις του όγκου μιας κατηγορίας ρύπων των τελευταίων 4 χρόνων δίνονται από τις παρατηρήσεις του διπλανού πίνακα, όπου η πρώτη στήλη δίνει τα έτη και η δεύτερη τον όγκο των ρύπων σε μια μονάδα μέτρησης. Με δεδομένο ότι η πρώτη χρονιά των παρατηρήσεων ήταν το 1999, να υπολογίσετε το ρυθμό μεταβολής του όγκου των ρύπων του έτους 2002, χρησιμοποιώντας ολόκληρο τον πίνακα τιμών.*

έτος	όγκος ρύπων
1999	4.2
2000	4.9
2001	5.8
2002	6.9

Λύση Με δεδομένο ότι η πρώτη χρονιά ήταν το 1999, δημιουργούμε τον διπλανό πίνακα διαφορών. Η τιμή που ζητάμε είναι στο τέλος του πίνακα και επιπλέον θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε όλο το φάσμα των δεδομένων. Μάλλον βολεύει να χρησιμοποιήσουμε τις προς τα πίσω διαφορές. Αφού οι διαφορές τρίτης τάξης είναι μηδέν, από (2.29) έχουμε $f(x) \approx f_0 - \theta\nabla f_0 + \frac{1}{2}\theta(\theta-1)\nabla^2 f_0$, οπότε παραγωγίζοντας παίρνουμε

έτος	x	f			
1999	1	4.2			
			0.7		
2000	2	4.9		0.2	
			0.9		0
2001	3	5.8		0.2	
			1.1		
2002	4	6.9			

$$f'(x) \approx -\frac{1}{h}(-\nabla f_0 + \frac{1}{2}(2\theta - 1)\nabla^2 f_0).$$

Για το πρόβλημά μας $x_0 = 4$, $h = 1$, $\theta = 0$, $f_0 = 6.9$, $\nabla f_0 = 1.1$ και $\nabla^2 f_0 = 0.2$. Έτσι βρίσκουμε ότι ο ρυθμός μεταβολής το 2002 είναι

$$f'(4) \approx -1 \cdot (-1.1 - 0.5 \cdot 0.2) = 1.2$$

3.2.2 Τα σφάλματα

Το σφάλμα που γίνεται από τους παραπάνω τύπους είναι για όλες τις περιπτώσεις ίδιο, δηλαδή

$$E(x) = P_n'(x) - f'(x) = (P_n(x) - f(x))'$$

Έχοντας υπόψη το Θεώρημα (2.2.2) και κάτω από συγκεκριμένες προϋποθέσεις, η παραπάνω σχέση μας δίνει το εξής

$$E(x) = (P_n(x) - f(x))' = -\frac{d}{dx}\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right) \tag{3.8}$$

Ωστόσο με θεωρία, που μάλλον ξεφεύγει από τους σκοπούς των σημειώσεών μας, είναι δυνατόν να βρεθούν τύποι, που θα μπορούσαν να μας βοηθήσουν να εκτιμήσουμε τα σφάλματα που δημιουργούνται. Για το λόγο αυτό δίνουμε στη συνέχεια το επόμενο Θεώρημα, χωρίς απόδειξη.

Θεώρημα 3.2.1 *Έστω μια συνάρτηση f, $n+2$ φορές παραγωγίσιμη σ' ένα διάστημα $[a,b]$ και $x_i \in [a,b], \forall i = 0(1)n$. Αν $P_n(x)$ το πολυώνυμο παρεμβολής στα παραπάνω σημεία, τότε για κάθε $x \in [a,b]$, υπάρχουν ξ και $\eta \ \in [a,b]$, έτσι ώστε*

$$P_n'(x) - f'(x) = -\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\sum_{k=0}^{n}\prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n}(x - x_i) + \frac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right) \tag{3.9}$$

Είναι φανερό ότι ο παραπάνω τύπος είναι μάλλον πολύπλοκος και δύσχρηστος. Πιο απλά ίσως είναι τα πράγματα για τον υπολογισμό του σφάλματος στο σημείο x_j, για ισαπέχοντα σημεία. Σ' αυτή την περίπτωση, ο δεύτερος όρος του αθροίσματος του δεξιού μέλους της (3.9) μηδενίζεται, όπως μηδενίζονται σχεδόν όλοι οι όροι του αθροίσματος του πρώτου όρου. Έτσι έχουμε

$$E(x_j) = P_n'(x) - f'(x)\Big|_{x=x_j} = \ -\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}(x_j - x_i) \tag{3.10}$$

Ακόμη πιο απλά είναι τα πράγματα για τον υπολογισμό του σφάλματος στο σημείο x_0. Τώρα έχουμε (Η απόδειξη αφήνεται ως άσκηση).

$$E(x_0) = P_n'(x) - f'(x)\Big|_{x=x_0} = \ (-1)^{n+1}\frac{f^{(n+1)}(\xi)\ h^n}{n+1} \tag{3.11}$$

Εκτός από τα σφάλματα αποκοπής, οι τύποι αριθμητικής παραγώγισης είναι ευαίσθητοι και στα σφάλματα στρογγύλευσης. Αν θεωρήσουμε, για παράδειγμα τον τύπο (3.5) για την εύρεση της παραγώγου στο σημείο f_0 και υποθέσουμε ότι για την προσεγγιστική τιμή στα σημεία x_0 και x_1 ισχύει $f_0^* = f_0 + e_0$ και $f_1^* = f_1 + e_1$ αντίστοιχα, τότε για την εκτίμηση του σφάλματος της παραγώγου θα ισχύει

$$\sigma = f'(x_0)^* - f'(x_0) = \frac{1}{h}(f_1^* - f_0^*) - \frac{1}{h}(f_1 - f_0) = \frac{1}{h}(e_1 - e_0) \tag{3.12}$$

Απολύτως δε, και με δεδομένο ότι εργαζόμαστε με ένα προκαθορισμένο (π.χ. k) πλήθος δεκαδικών ψηφίων, πράγμα που σημαίνει ότι $|e_i| \leq 0.5 \cdot 10^{-k},\ i = 0, 1$, παίρνουμε

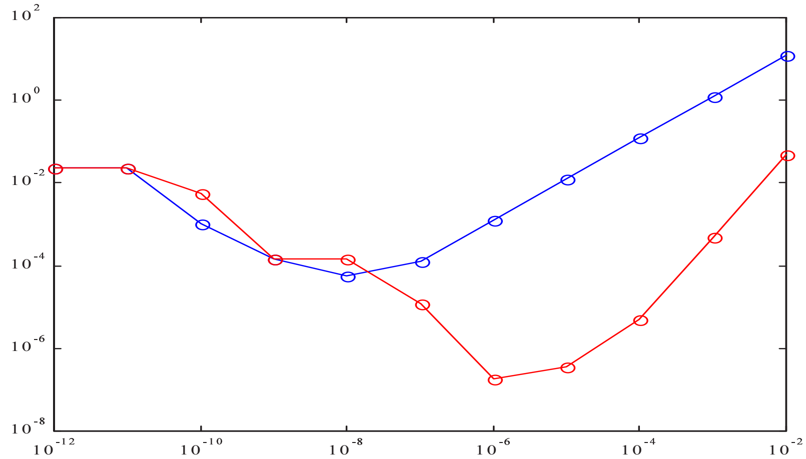
$$|\sigma| = \frac{1}{h}|e_1 - e_0| \leq \frac{1}{h}(|e_1| + |e_0|) \leq \frac{1}{h}10^{-k}$$

Παρατηρούμε λοιπόν ότι, ενώ το h μικραίνει, το σφάλμα μεγαλώνει. Έτσι λοιπόν συνολικά, ενώ κάποιος θα περίμενε ότι όσο πιο μικρό γίνεται το h, τόσο καλύτερα (ακριβέστερα) αποτελέσματα θα έχει, δυστυχώς από κάποιο σημείο και πέρα τα πράγματα αλλάζουν και τα αποτελέσματα γίνονται χειρότερα. Στο σχήμα (3.2) απεικονίζεται το σφάλμα, που γίνεται στον υπολογισμό της συνάρτησης $f(x) = x^5$ με τους τύπους (3.5) και (3.6), καθώς το h μειώνεται από 10^{-2} σε 10^{-12}. Φαίνεται καθαρά ότι, ενώ αρχικά το σφάλμα μειώνεται, καθώς μειώνεται το h, στη συνέχεια αυξάνει, καθώς το h μειώνεται περαιτέρω.

3.3 Τύποι με υπολογισμό συντελεστών

Για την εύρεση και δημιουργία τύπων αριθμητικής παραγώγισης χρησιμοποιείται πολλές φορές η μέθοδος των προσδιοριστέων συντελεστών. Στην περίπτωση αυτή, από πριν αποφασίζεται ποια σημεία θα πάρουν μέρος στον τύπο υπολογισμού μιας συγκεκριμένης παραγώγου και δημιουργείται ένας τύπος, όπου ένας αριθμός παραμέτρων πρέπει να καθοριστεί. Για τον καθορισμό των παραμέτρων δημιουργούνται τόσες εξισώσεις, όσες οι άγνωστοι, απαιτώντας ο προς προσδιορισμό τύπος να είναι ακριβής για πολυώνυμα $1, x, x^2, x^3, \ldots$. Για τα πολυώνυμα και τους τύπους αριθμητικής παραγώγισης ισχύει το επόμενο Θεώρημα.

Θεώρημα 3.3.1 *Έστω Π_n το σύνολο των πολυώνυμων βαθμού n. Ένας τύπος αριθμητικής παραγώγισης είναι ακριβής $\forall P_n(x) \in \Pi_n$, αν και μόνον αν είναι ακριβής για καθένα από τα πολυώνυμα $1, x, x^2, x^3, \ldots, x^n$.*



Σχήμα 3.2: Το σφάλμα για την παράγωγο της $f(x) = x^5$ με τους τύπους (3.5) και (3.6)

Απόδειξη: Αφού ο τύπος μας είναι ακριβής $\forall P_n(x) \in \Pi_n$, είναι ακριβής και για τα πολυώνυμα $1, x, x^2, x^3, \ldots, x^n$ ως στοιχεία του συνόλου Π_n. Αντιστρόφως, αν είναι ακριβής για τα πολυώνυμα $1, x, x^2, x^3, \ldots, x^n$, λόγω της γραμμικότητας της παραγώγισης (δηλ. ότι $(af + bg)' = af' + bg'$) θα είναι ακριβής και για το γραμμικό συνδυασμό αυτών, δηλαδή το πολυώνυμο $P_n(x)$. □

Για την κατανόηση και εμπέδωση της παραπάνω διαδικασίας, δίνουμε το επόμενο παράδειγμα

Παράδειγμα 3.2 *Να προσδιοριστούν οι συντελεστές a, b, c στον επόμενο προσεγγιστικό τύπο αριθμητικής παραγώγισης, ισαπεχόντων σημείων*

$$f_0' = \frac{1}{h}(af_{-1} + bf_0 + cf_2). \tag{3.13}$$

Λύση Από τους τύπους (2.12) και (2.26) έχουμε $x_{-1} = x_0 - h$, και $x_2 = x_0 + 2h$. Θεωρούμε αρχικά τη συνάρτηση $f(x) = 1$, οπότε $f'(x) = 0$. Αντικαθιστώντας στον (3.13) έχουμε

$$\frac{1}{h}(a+b+c)=0 \quad \text{οπότε} \;\; a+b+c=0 \quad (i)$$

Θεωρούμε τώρα τη συνάρτηση $f(x)=x$, οπότε $f'(x)=1$, αντικαθιστώντας στον (3.13) έχουμε

$$\frac{1}{h}[a(x_0-h)+bx_0+c(x_0+2h)]=1,$$

οπότε λαμβάνοντας υπόψη την (i) παίρνουμε

$$-a+2c=1 \quad (ii)$$

Τέλος θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x)=x^2$, με $f'(x)=2x$, αντικαθιστώντας στον (3.13) έχουμε

$$\begin{aligned} 2x_0 &= \frac{1}{h}[a(x_0-h)^2+bx_0^2+c(x_0+2h)^2] \\ &= \frac{1}{h}[x_0^2(a+b+c)+2x_0h(-a+2c)+h^2(a+4c)]. \end{aligned}$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις (i) και (ii) παίρνουμε

$$h(a+4c)=0, \quad \text{οπότε} \;\; a+4c=0 \quad (iii)$$

Λύνοντας το σύστημα των τριών εξισώσεων (i), (ii) και (iii), βρίσκουμε τους συντελεστές $a=-\frac{2}{3}$, $b=\frac{1}{2}$ και $c=\frac{1}{6}$. Ο δε τύπος (3.13) γίνεται

$$f_0'=\frac{1}{h}\left(-\frac{2}{3}f_{-1}+\frac{1}{2}f_0+\frac{1}{6}f_2\right)=\frac{1}{6h}\left(-4f_{-1}+3f_0+f_2\right) \tag{3.14}$$

Παράδειγμα 3.3 *Οι διαθέσιμες πληροφορίες, των τελευταίων 4 χρόνων, του όγκου των υδάτινων πόρων της περιοχής μας δίνονται στον διπλανό πίνακα, όπου η πρώτη στήλη δίνει τα έτη και η δεύτερη τον όγκο των πόρων σε μια μονάδα μέτρησης. Με δεδομένο ότι η πρώτη χρονιά των παρατηρήσεων ήταν το 1999, να υπολογίσετε το ρυθμό μεταβολής του όγκου των υδάτινων πόρων του έτους 2000.*

έτος	όγκος
1999	6.2
2000	5.9
2001	–
2002	5.5

Λύση Με δεδομένο ότι η πρώτη χρονιά ήταν το 1999, δημιουργούμε το διπλανό πίνακα, θέτοντας τη μεταβλητή $x = 1$, τη χρονιά 1999 και $x = 4$, το 2002. Επειδή η τιμή που ζητάμε είναι στο έτος 2000 και το έτος 2001 δεν έχουμε πληροφορία, θα χρησιμοποιήσουμε τον τύπο (3.14), που πριν λίγο δημιουργήσαμε, θεωρώντας ότι οι τιμές ισαπέχουν. Έτσι παίρνουμε

έτος	x	f
1999	1	6.2
2000	2	5.9
2001	3	–
2002	4	5.5

$$f_0' = \frac{1}{6h}(-4f_{-1} + 3f_0 + f_2) = \frac{1}{6}(-4 \cdot 6.2 + 3 \cdot 5.9 + 5.5) = -0.2667$$

3.4 Τύποι από Taylor

Ένας ακόμη τρόπος για τη δημιουργία τύπων αριθμητικής παραγώγισης είναι ο γνωστός τύπος του Taylor ([2], [8]).

$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{(x-x_0)}{1!}f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{(x-x_0)^n}{n!}f^{(n)}(x_0) \tag{3.15}$$

Η διόρθωση στην περίπτωση του τύπου του Taylor είναι

$$R(x) = \frac{(x-x_0)^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi), \quad \text{με} \quad \xi \in (x, x_0) \text{ ή } \xi \in (x_0, x) \tag{3.16}$$

Γράφοντας από τον τύπο (3.15) μόνο τους δυο πρώτους όρους, θέτοντας $x = x_0 + h$, έχουμε

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) \;\; \text{δηλαδή} \;\; f_1 = f_0 + hf_0'$$

απ' όπου προκύπτει ο γνωστός τύπος (3.5). Επίσης από τον τύπο (3.15), γράφοντας μόνον τους δυο πρώτους όρους και θέτοντας $x = x_0 - h$ έχουμε

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) \;\; \text{δηλαδή} \;\; f_1 = f_0 - hf_0'$$

απ' όπου προκύπτει $f_0' = -\frac{1}{h}(f_1 - f_0)$, που είναι ο αντίστοιχος του τύπου (3.5), με προς τα πίσω διαφορές. Μπορεί κάποιος να παρατηρήσει από τη διόρθωση (3.16) ότι και οι δυο τύποι (υπό την προϋπόθεση ότι η f'' είναι φραγμένη) είναι $O(h^2)$.

Φυσικά μπορούμε να δημιουργήσουμε τύπους μεγαλύτερης ακρίβειας, εκμεταλλευόμενοι κατάλληλα τον τύπο (3.15). Έτσι, για παράδειγμα, εφαρμόζοντας τον τύπο για $x = x_0 - 2h, x_0 - h, x_0 + h, x_0 + 2h$, έχουμε

$$\begin{aligned} f(x_0 - 2h) &= f(x_0) - 2hf'(x_0) + \frac{(-2h)^2}{2!} f''(x_0) - \frac{(-2h)^3}{3!} f''(x_0) + \cdots \\ f(x_0 - h) &= f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{(-h)^2}{2!} f''(x_0) - \frac{(-h)^3}{3!} f''(x_0) + \cdots \\ f(x_0 + h) &= f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{(h)^2}{2!} f''(x_0) + \frac{(h)^3}{3!} f''(x_0) + \cdots \qquad (3.17) \\ f(x_0 + 2h) &= f(x_0) + 2hf'(x_0) + \frac{(-2h)^2}{2!} f''(x_0) + \frac{(-2h)^3}{3!} f''(x_0) + \cdots \end{aligned}$$

πολλαπλασιάζοντας τις σχέσεις που προκύπτουν με συντελεστές a, b, c, d και προσθέτοντας κατά μέλη προκύπτει

$$\begin{aligned} af(x_0 - 2h) &+ bf(x_0 - h) + cf(x_0 + h) + df(x_0 + 2h) \\ &= (a + b + c + d)f(x_0) + \frac{h}{1}(-2a - b + c + d)f'(x_0) \qquad (3.18) \\ &+ \frac{h^2}{2}(4a + b + c + 4d)f''(x_0) + \frac{h^3}{6}(-8a - b + c + 8d)f'''(x_0) + \cdots \end{aligned}$$

Απαιτώντας τώρα

$a+b+c+d = 0,\ -2a-b+c+d = 1,\ 4a+b+c+4d = 0,$ και $-8a-b+c+8d = 0,$

βρίσκουμε $a = \frac{1}{12},\ b = -\frac{2}{3},\ a = \frac{2}{3},\ a = -\frac{1}{12}$. Έτσι, μετά από λίγες πράξεις, έχουμε το τύπο

$$f_0' \approx \frac{1}{12h}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2) \qquad (3.19)$$

Ο τύπος (3.21), αφού οι όροι που περιέχουν τα h^2 και h^3 μηδενίζονται, είναι $O(h^4)$.

3.5 Παράγωγοι υψηλότερης τάξης

Η θεωρία που αναπτύχθηκε στις προηγούμενες παραγράφους, μπορεί να αναπτυχθεί και για την εύρεση τύπων αριθμητικής παραγώγισης υψηλότερης τάξης. Δε θα ασχοληθούμε ιδιαίτερα μ' αυτούς τους τύπους. Ωστόσο θα βρούμε δυο τύπους για την πληρότητα του κειμένου. Παραγωγίζοντας τον τύπο (3.3) παίρνουμε

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{1}{h^2}\cdot\frac{d}{d\theta}\left(\triangle f_0+\frac{1}{2}(2\theta-1)\triangle^2 f_0\cdots+\frac{d}{d\theta}\binom{\theta}{n}\triangle^n f_0\right) \text{ οπότε} \\ f''(x) &= \frac{1}{h^2}\cdot\left(\triangle^2 f_0+(\theta-1)\triangle^3 f_0\cdots+\frac{d}{d\theta}\binom{\theta}{n}\triangle^n f_0\right) \end{aligned} \tag{3.20}$$

Επίσης, χρησιμοποιώντας τους τύπους του Taylor, αν στην ισότητα (3.18) απαιτήσουμε

$a+b+c+d=0,\ -2a-b+c+d=0,\ 4a+b+c+4d=1,$ και $-8a-b+c+8d=0,$

είναι δυνατόν να βρούμε $a=\frac{1}{6}, b=-\frac{1}{6}, c=-\frac{1}{6}$ και $d=\frac{1}{6}$. Έτσι μετά από λίγες πράξεις έχουμε τον τύπο

$$f_0''\approx\frac{1}{6h^2}(f_{-2}-f_{-1}+f_1-f_2) \tag{3.21}$$

Ο τύπος (3.21), αφού οι όροι που περιέχουν τα h και h^3 μηδενίζονται, είναι $O(h^4)$.

Ωστόσο, θα πρέπει να αναφερθεί ότι ένας από τους πλέον εύχρηστους και συχνά εμφανιζόμενους τύπους στη βιβλιογραφία είναι ο επόμενος, του οποίου η εύρεση αφήνεται ως άσκηση

$$f''(x)=\frac{1}{h^2}(f_{-1}-2f_0+f_1) \tag{3.22}$$

Ασκήσεις

Άσκηση 3.1 *Να βρεθεί η τιμή της $y'(0.1)$, που ορίζεται από τα σημεία του πίνακα*

x	0	0.1	0.2	0.3
y	4.231	4.132	4.256	4.5643

, χρησιμοποιώντας όλα τα δεδομένα του, δημιουργώντας ένα κατάλληλο τύπο από τη σχέση (3.7).

Άσκηση 3.2 *Τα σημεία του επόμενου πίνακα, δίνουν τις ποσότητες και τους ρυθμούς μεταβολής μιας συνάρτησης κατά τις αντίστοιχες χρονικές στιγμές.*

t	f	f'
0.50	*4.231*	*1.132*
0.75	*5.631*	*1.132*

Χρησιμοποιώντας κατάλληλα τα δεδομένα, να υπολογίσετε το ρυθμό μεταβολής την επόμενη χρονική στιγμή, δημιουργώντας τύπο της μορφής

$$f_2' = \frac{1}{h}(af_0 + bf_1) + cf_0' + df_1'.$$

Χρησιμοποιήστε τον τύπο για τη συνάρτηση $f(x) = \sin x$ *στα σημεία* $x_0 = \frac{\pi}{6}$ *και* $x_1 = \frac{\pi}{4}$ *για να βρείτε το* $f'(\frac{\pi}{3})$. *Να βρείτε το σφάλμα που γίνεται.*

Άσκηση 3.3 *Χρησιμοποιώντας τον τύπο του Taylor, να αποδείξετε τους τύπους*

$$a)f'(x) = \frac{1}{12h}(f_2 - 8f_1 + 8f_1 - f_2), \quad b)f''(x) = \frac{1}{h^2}(f_{-1} - 2f_0 + f_1)$$

Ποιας τάξης είναι ο καθένας ως προς το σφάλμα;

Αριθμητική Ολοκλήρωση

4.1 Γενικά

Ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα των Μαθηματικών είναι η Ολοκλήρωση. Δυστυχώς για να βρούμε την παράγουσα συνάρτηση μιας συνάρτησης f δεν έχουμε μηχανισμούς, όπως ακριβώς συμβαίνει με την παράγωγο ή για την ακρίβεια έχουμε πολύ λίγους και γι΄ αυτό καταφεύγουμε σε τεχνάσματα. Όμως τα τεχνάσματα, παρόλο που μας δίνουν λύση σε πάρα πολλές περιπτώσεις, δε δίνουν λύση σε όλες τις περιπτώσεις, οπότε η εύρεση του ορισμένου ολοκληρώματος (δηλαδή του εμβαδού που περικλείεται από τη γραφική παράσταση της $f(x)$, του οριζόντιου άξονα και τις κατακόρυφες στα άκρα ενός διαστήματος) είναι αδύνατη. Το μεγάλο κενό που δημιουργείται έρχεται να λύσει η Αριθμητική Ανάλυση προσφέροντας λύσεις αριθμητικές (με υπολογισμούς). Για παράδειγμα το ολοκλήρωμα $\int \frac{e^x}{x}dx$ δεν μπορεί να εκφραστεί με στοιχειώδεις συναρτήσεις. Ωστόσο το ολοκλήρωμα $\int_1^2 \frac{e^x}{x}dx$ πολύ εύκολα μπορεί κάποιος να βρει ότι είναι 3.05912 με πολύ καλή ακρίβεια. Την ιδέα για τον υπολογισμό εμβαδού μας τον έδωσαν πολύ νωρίς οι Αρχαίοι Έλληνες (π.χ. Ο Αρχιμήδης είχε προτείνει την προσεγγιστική εύρεση του εμβαδού του κύκλου). Επίσης η αριθμητική ολοκλήρωση χρησιμοποιείται στην περίπτωση που δε γνωρίζουμε ακριβώς τη συνάρτηση, αλλά ορισμένα σημεία της (περιπτώσεις που είδαμε σε προηγούμενα κεφάλαια). Όμως αριθμητική ολοκλήρωση χρησιμοποιούμε και σε περιπτώσεις που είναι γνωστή η παράγουσα συνάρτηση, αλλά ο τύπος της είναι πολύπλοκος και τέτοιες συναρτήσεις είναι πολλές και προκύπτουν και από απλές προς ολοκλήρωση συναρτήσεις π.χ.

$$\int \frac{1}{3-x^3}dx = \frac{2\sqrt{3}\,\arctan(\frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{2\,x}{\sqrt[6]{3^5}}) - 2\,\ln(-3+\sqrt[3]{3^2}\,x) + \ln(3+\sqrt[3]{3}\,x\,\left(\sqrt[3]{3}+x\right))}{6\,\cdot\,\sqrt[3]{3^2}}$$

Ίσως θα πρέπει να παρατηρήσουμε ότι πέρα από την πολυπλοκότητα των πράξεων, οι προς υπολογισμό παραστάσεις δε θα δώσουν ακριβείς τιμές, αλλά προσεγγιστικές, πράγμα που σημαίνει ότι η τελικά προκύπτουσα ποσότητα δεν είναι η ακριβής αλλά κάποια προσεγγιστική.

Στη συνέχεια και για ολόκληρο το κεφάλαιο της Αριθμητικής Ολοκλήρωσης θα θεωρήσουμε ότι οι τιμές των σημείων $x_i,\ i = 0(1)n$ ισαπέχουν.

4.2 Αριθμητική Ολοκλήρωση από την παρεμβολή

4.2.1 Ο κανόνας του ορθογωνίου

Έστω το προς υπολογισμό ολοκλήρωμα

$$I = \int_a^b f(x)dx, \tag{4.1}$$

όπου η $f(x)$ είναι μια ολοκληρώσιμη συνάρτηση. Θέτουμε $x_0 = a$ και $x_1 = b$ και προσεγγίζουμε την $f(x)$ με προς τα εμπρός διαφορές, από τον τύπο (2.23) παίρνοντας τον πρώτο όρο μόνον. Έτσι έχουμε

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f_0\,dx = f_0(x_1 - x_0) = h \cdot f_0 \tag{4.2}$$

Ο τύπος (4.2) καλείται τύπος του ορθογωνίου και μπορεί να εφαρμοστεί και στην περίπτωση όπου το διάστημα $[a, b]$ χωρίζεται σε n ισομήκη μικρότερα διαστήματα. Στην περίπτωση αυτή εφαρμόζοντας τον τύπο διαδοχικά στα διαστήματα αυτά παίρνουμε το γενικευμένο κανόνα του ορθογωνίου που είναι ο επόμενος

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx h \cdot (f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1}) \tag{4.3}$$

Από το Θεώρημα (2.2.2) μπορούμε να εκτιμήσουμε το σφάλμα που κάνουμε ως εξής. Αφού θέσαμε $f(x) \approx f_0$, προφανώς θα έχουμε

$$\varepsilon = h \cdot f_0 - \int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} f'(\xi(x))(x - x_0)\,dx \tag{4.4}$$

Θεωρώντας ότι η f' είναι συνεχής στο $[x_0, x_1]$, ϑα έχει μέγιστο (έστω το M) και ελάχιστο (έστω το m). Έτσι ϑα ισχύει

$$m \leq f'(\xi(x)) \leq M$$

Με δεδομένο ότι το $x - x_0 \geq 0$, πολλαπλασιάζοντας όλα τα μέλη της προηγούμενης μ' αυτό και ολοκληρώνοντας έχουμε

$$m \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\, dx \leq \int_{x_0}^{x_1} f'(\xi(x))(x - x_0)\, dx \leq M \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\, dx$$

ή ισοδύναμα

$$\frac{\int_{x_0}^{x_1} f'(\xi(x))(x - x_0)\, dx}{\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\, dx} \in [m, M]$$

επομένως, από το Θεώρημα της ενδιάμεσης τιμής, ϑα υπάρχει ένα $\eta \in [x_0, x_1]$ έτσι ώστε να ισχύει

$$\frac{\int_{x_0}^{x_1} f'(\xi(x))(x - x_0)\, dx}{\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\, dx} = f'(\eta)$$

οπότε τελικά έχουμε

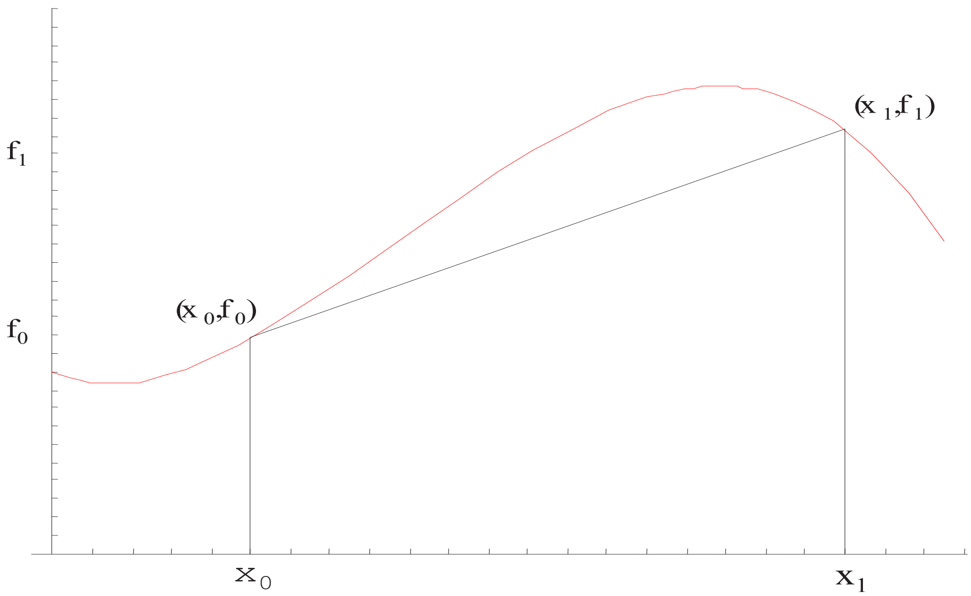
$$\varepsilon = f'(\eta) \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\, dx = \frac{h^2}{2} f'(\eta)\cdot \tag{4.5}$$

Γίνεται πλέον φανερό ότι το σφάλμα στην περίπτωση του ορθογωνίου είναι $O(h^2)$.

4.2.2 Ο κανόνας του τραπεζίου

Για τον υπολογισμό τώρα του ολοκληρώματος (4.1), προσεγγίζουμε την συνάρτηση $f(x)$ με τους δυο πρώτους όρους της παρεμβολής με προς τα εμπρός διαφορές από τον τύπο (2.23). Έτσι έχουμε

$$I = \int_a^b f(x)\, dx \approx \int_{x_0}^{x_1} (f_0 + \theta \triangle f_0)\, dx, \tag{4.6}$$



Σχήμα 4.3: Γεωμετρική ερμηνεία του κανόνα του τραπεζίου

όπου $\theta = \frac{x-x_0}{h}$ και $\triangle f_0 = f_1 - f_0$. Αντικαθιστώντας αυτά στην (4.6) και κάνοντας μερικές εύκολες πράξεις προκύπτει

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(f_0 + f_1) \tag{4.7}$$

Ο τύπος του τραπεζίου (4.7) μπορεί να εφαρμοστεί, όπως και προηγουμένως, και στην περίπτωση όπου το διάστημα $[a, b]$ χωρίζεται σε n ισομήκη μικρότερα διαστήματα. Στην περίπτωση αυτή, εφαρμόζοντας τον τύπο διαδοχικά στα διαστήματα αυτά, παίρνουμε τον γενικευμένο κανόνα του τραπεζίου, που είναι ο επόμενος

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2} \cdot (f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \tag{4.8}$$

Τη γεωμετρική ερμηνεία του τύπου του τραπεζίου μπορεί κάποιος να τη δει στο σχήμα (4.3). Στο σχήμα φαίνεται πλέον καθαρά ότι το εμβαδόν που προσδιόριζε το ολοκλήρωμα (4.1), προσεγγίζεται από το εμβαδόν ενός τραπεζίου. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο ο τύπος (4.6) ονομάστηκε κανόνας του τραπεζίου.

Θα προσδιορίσουμε στη συνέχεια την τάξη του σφάλματος. Απο το Θεώρημα (2.2.2) έχουμε

$$\varepsilon = \frac{h}{2} \cdot (f_0 + f_1) - \int_{x_0}^{x_1} f(x)\, dx = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)\, dx \quad (4.9)$$

Θεωρώντας ότι η f'' είναι συνεχής στο $[x_0, x_1]$, θα έχει μέγιστο (έστω το M) και ελάχιστο (έστω το m). Έτσι θα ισχύει

$$m \leq f''(\xi(x)) \leq M$$

Με δεδομένο ότι το $(x - x_0)(x - x_1) \leq 0$, πολλαπλασιάζοντας όλα τα μέλη της προηγούμενης μ' αυτό και ολοκληρώνοντας έχουμε

$$m \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\, dx \geq \int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)\, dx$$

$$\geq M \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\, dx$$

ή ισοδύναμα

$$\frac{\int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)\, dx}{\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\, dx} \in [m, M]$$

επομένως, από το Θεώρημα της ενδιάμεσης τιμής, θα υπάρχει ένα $\eta \in [x_0, x_1]$ έτσι ώστε να ισχύει

$$\frac{\int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)\, dx}{\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\, dx} = f''(\eta)$$

οπότε βρίσκουμε

$$\int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x-x_0)(x-x_1)\,dx = f''(\eta)\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)\,dx.$$

Ύστερα από τις ολοκληρώσεις και αφού λάβουμε υπόψη μας τον τύπο (4.9), έχουμε

$$\varepsilon = \frac{1}{2}f''(\eta)\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)\,dx = -\frac{h^3}{12}f''(\eta). \tag{4.10}$$

Γίνεται πλέον φανερό ότι το σφάλμα στην περίπτωση του τραπεζίου είναι $O(h^3)$.

Για τον υπολογισμό της τάξης του σφάλματος του γενικευμένου τύπου του τραπεζίου (4.8) μπορούμε να σκεφτούμε ως εξής: Για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος τώρα, έχουμε χωρίσει το διάστημα $[a,b]$ σε n διαστήματα. Έτσι έχουμε

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \tag{4.11}$$

οπότε, αν $\varepsilon_i = -\frac{h^3}{12}f''(\eta_i)$ είναι το σφάλμα που γίνεται σε κάθε διάστημα $[x_{i-1},x_i]$ από τον τύπο (4.10), τότε έχοντας υπόψη τον τύπο (4.11) βρίσκουμε

$$\varepsilon_{ολ} = \sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) \tag{4.12}$$

Με την $f''(x)$ συνεχή ισχύει ότι

$$\begin{aligned} m &\le f''(\eta_1) &\le M \\ m &\le f''(\eta_2) &\le M \\ &\vdots & \\ m &\le f''(\eta_n) &\le M \end{aligned} \tag{4.13}$$

Αθροίζοντας κατά μέλη στην (4.13) και διαιρώντας με n προκύπτει

$$m \le \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) \le M \tag{4.14}$$

Από το Θεώρημα της ενδιάμεσης τιμής θα υπάρχει ένα $\hat{\eta}$ για το οποίο θα ισχύει $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) = f''(\hat{\eta})$ ή ισοδύναμα $\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) = nf''(\hat{\eta})$. Λαμβάνοντας αυτό υπόψη στην (4.12), τελικά έχουμε

$$\varepsilon_{\text{ολ}} = -\frac{h^3}{12}nf''(\hat{\eta}) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\hat{\eta}) \tag{4.15}$$

Παρατήρηση 4.2.1 *Εκείνο που θα παρατηρούσε κάποιος είναι ότι, όταν χρησιμοποιούμε το γενικευμένο κανόνα του τραπεζίου, το ολικό σφάλμα είναι $O(h^2)$, σε αντίθεση με το σφάλμα του απλού κανόνα του τραπεζίου που είναι $O(h^3)$.*

Παράδειγμα 4.1 *Να υπολογίσετε το Ολοκλήρωμα*

$$\int_{1.5}^{2.5} \frac{x}{x^3-2}dx,$$

χρησιμοποιώντας το γενικευμένο κανόνα του τραπεζίου (4.8), χωρίζοντας το διάστημα ολοκλήρωσης σε 10 υποδιαστήματα

Λύση Αφού θα χρησιμοποιήσουμε τον κανόνα του τραπεζίου για 10 διαστήματα, θα έχουμε $n = 10$ και $h = 0.1$, οπότε $x_0 = 1.5$ και $x_i = 1.5 + i \cdot h,\ i = 1(1)10$. Για τις τιμές των x_i βρίσκουμε τις αντίστοιχες f_i δηλαδή $f_0 = 0.763359, f_1 = 0.583591, f_2 = 0.469729, f_3 = 0.391027, f_4 = 0.333333, f_5 = 0.289216, f_6 = 0.254394, f_7 = 0.226222,\ f_8 = 0.202977, f_9 = 0.183486, f_{10} = 0.166923$. Από τον τύπο (4.8) βρίσκουμε

$$\begin{aligned}
\int_{1.5}^{2.5} \frac{x}{x^3-3}dx &= \frac{0.1}{2}(0.763359 + 2 \cdot 0.583591 + 2 \cdot 0.469729 + 2 \cdot 0.391027 \\
&+ 2 \cdot 0.333333 + 2 \cdot 0.289216 + 2 \cdot 0.254394 + 2 \cdot 0.226222 \\
&+ 2 \cdot 0.202977 + 2 \cdot 0.183486 + 0.166923) \\
&= 0.415105
\end{aligned}$$

4.2.3 Ο κανόνας του Simpson

Για τον υπολογισμό τώρα του ολοκληρώματος (4.1) προσεγγίζουμε τη συνάρτηση $f(x)$ με τους τρεις πρώτους όρους της παρεμβολής των προς τα εμπρός διαφορών από τον τύπο (2.23). Είναι φανερό ότι τώρα χρειαζόμαστε τρία σημεία για την προσέγγιση αυτή, έστω τα $x_0 = a, x_1$ και $x_2 = b$. Έτσι έχουμε

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_{x_0}^{x_2} (f_0 + \theta \nabla f_0 + \binom{\theta}{2} \triangle^2 f_0)\,dx, \tag{4.16}$$

όπου $\theta = \frac{x-x_0}{h}$, $\triangle f_0 = f_1 - f_0$ και $\triangle^2 f_0 = f_2 - 2f_1 + f_0$. Αντικαθιστώντας αυτά στην (4.16), το $dx = hd\theta$ και προσαρμόζοντας κατάλληλα τα άκρα της ολοκλήρωσης προκύπτει

$$I \approx h \int_0^2 (f_0 + \theta(f_1 - f_0)f_0 + \frac{\theta(\theta-1)}{2}(f_2 - 2f_1 + f_0)\,d\theta. \tag{4.17}$$

Έπειτα από μερικές εύκολες πράξεις παίρνουμε

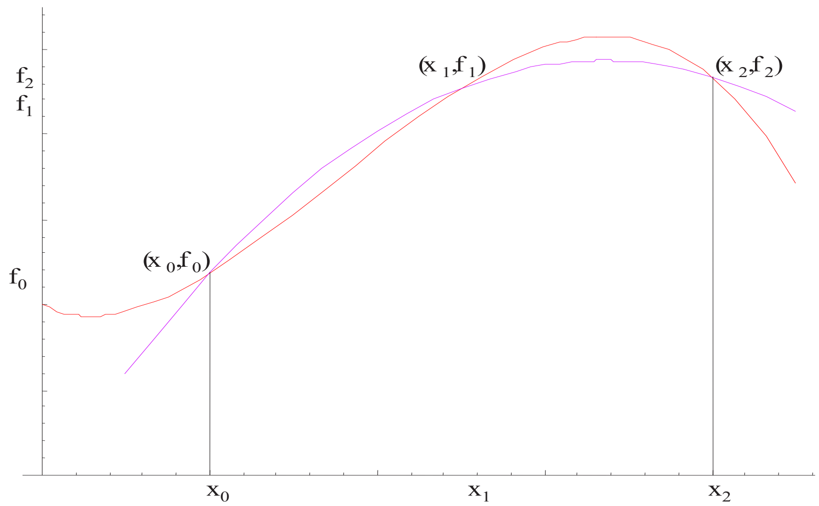
$$\int_{a=x_0}^{b=x_2} f(x) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2). \tag{4.18}$$

Ο τύπος του Simpson (4.18) μπορεί να εφαρμοστεί και στην περίπτωση όπου το διάστημα $[a, b]$ χωρίζεται σε $2n$ ισομήκη μικρότερα διαστήματα. Στην περίπτωση αυτή εφαρμόζοντας τον τύπο διαδοχικά στα διαστήματα αυτά παίρνουμε το γενικευμένο κανόνα του Simpson, που είναι ο επόμενος

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3} \cdot (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 \cdots + 4f_{2n-1} + f_{2n}) \tag{4.19}$$

Η γεωμετρική ερμηνεία του τύπου του Simpson φαίνεται στο σχήμα (4.4). Στο σχήμα φαίνεται πλέον καθαρά ότι η καμπύλη προσεγγίζεται από μια παραβολή και το εμβαδόν που προσδιόριζε το ολοκλήρωμα (4.1) προσεγγίζεται από το εμβαδόν που προσδιορίζει η παραβολή αυτή.

Για να βρούμε την τάξη του σφάλματος, δυστυχώς δεν μπορούμε να ακολουθήσουμε αυτούσια τη διαδικασία που ακολουθήσαμε στον κανόνα του τραπεζίου και του ορθογωνίου. Θα δώσουμε όμως την τάξη του σφάλματος χρησιμοποιώντας τον τύπο του Taylor (3.15). Για το σκοπό αυτό αναπτύσσουμε



Σχήμα 4.4: Γεωμετρική ερμηνεία του κανόνα του Simpson

τον τύπο του Taylor γύρω από το σημείο x_1. Το τυχαίο σημείο $x \in [x_0, x_2]$ προκύπτει ως $x = x_1 + h\theta$, όπου $\theta \in [-1, 1]$ και $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$.

$$f(x) = f(x_1) + \frac{f'(x_1)}{1!}h\theta + \frac{f''(x_1)}{2!}h^2\theta^2 + \frac{f'''(x_1)}{3!}h^3\theta^3 + \frac{f^{(4)}(x_1)}{4!}h^4\theta^4 + \cdots \tag{4.20}$$

Ολοκληρώνοντας αυτή από x_1 μέχρι x_2 και λαμβάνοντας υπόψη ότι $dx = hd\theta$ και ότι, όταν ολοκληρώνουμε ως προς θ, τα άκρα της ολοκλήρωσης είναι -1 και 1 έχουμε

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx &= f(x_1)h\Big[\theta\Big]_{-1}^{1} + \frac{f'(x_1)}{1!}h^2\Big[\frac{\theta^2}{2}\Big]_{-1}^{1} + \frac{f''(x_1)}{2!}h^3\Big[\frac{\theta^3}{3}\Big]_{-1}^{1} \\ &+ \frac{f'''(x_1)}{3!}h^4\Big[\frac{\theta^4}{4}\Big]_{-1}^{1} + \frac{f^{(4)}(x_1)}{4!}h^5\Big[\frac{\theta^5}{5}\Big]_{-1}^{1} + \cdots \end{aligned} \tag{4.21}$$

Κάνοντας τις λίγες εύκολες πράξεις που εμφανίζονται, παίρνουμε

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3 f''(x_1)}{3} + \frac{h^5 f^{(4)}(x_1)}{60} + \cdots \tag{4.22}$$

Θα δημιουργήσουμε στη συνέχεια τον τύπο του Simpson εφαρμόζοντας κατάλληλα το τύπο του Taylor.

$$\begin{aligned} f(x_0) &= f(x_1) - \frac{f'(x_1)}{1!}h + \frac{f''(x_1)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_1)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_1)}{4!}h^4 - \cdots \\ f(x_2) &= f(x_1) + \frac{f'(x_1)}{1!}h + \frac{f''(x_1)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_1)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_1)}{4!}h^4 + \cdots \end{aligned} \tag{4.23}$$

Προσθέτοντας τις δυο ισότητες της (4.23) κατά μέλη, προσθέτοντας και στα δύο μέλη το $4f_1$ και διαιρώντας με $\frac{h}{3}$ παίρνουμε

$$\frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f2) = 2f(x_1)h + \frac{f''(x_1)}{3}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_1)}{36}h^5 + \cdots \tag{4.24}$$

Έχοντας στο μυαλό μας ότι το h είναι σχετικά μικρό και λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (4.22) και (4.24) για το σφάλμα, βλέπουμε ότι

$$\varepsilon = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f2) - \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx -\frac{h^5 f^{(4)}(x_1)}{90} \tag{4.25}$$

Είναι φανερό λοιπόν ότι το σφάλμα στον κανόνα του Simpson είναι $O(h^5)$ και εξαρτάται από τις τέταρτης τάξης παραγώγους. Είναι ακριβής λοιπόν για πολυώνυμα μέχρι και τρίτου βαθμού. Μια διαφορετική προσέγγιση του παραπάνω θα μπορούσε κάποιος να βρει στο ([1]).

Εργαζόμενοι όπως στον κανόνα του τραπεζίου και του ορθογωνίου, μπορούμε να εκτιμήσουμε το σφάλμα στο γενικευμένο κανόνα του Simpson, αλλά η διαδικασία αφήνεται ως άσκηση για τον αναγνώστη. Η τελική μορφή έχει ως εξής

$$\varepsilon_{\text{ολ}} \approx \frac{h^4(b-a)f^{(4)}(\hat{\eta})}{180} \tag{4.26}$$

Φανερά το σφάλμα τώρα είναι $O(h^4)$.

Παρατήρηση 4.2.2 *Σε όλες τις περιπτώσεις τα σφάλματα των γενικευμένων τύπων, υπό την προϋπόθεση ότι μπορούμε να εκτιμήσουμε ένα φράγμα για την* *παράγωγο της τάξης που χρησιμοποιείται, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να βρούμε τον ελάχιστο αριθμό σημείων που πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για να χωρίσουμε το διάστημά μας, για να υπολογίσουμε το εμβαδόν με επιθυμητή ακρίβεια.*

Παράδειγμα 4.2 *Να χρησιμοποιήσετε το γενικευμένο κανόνα του Simpson για την εύρεση του ολοκληρώματος*

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

αφού προϋπολογίσετε τον αριθμό των διαστημάτων και του h που θα χρησιμοποιήσετε, ώστε το απόλυτο σφάλμα να μην υπερβαίνει το $\varepsilon = 0.0005$.

Λύση Για την περίπτωση του γενικευμένου κανόνα του Simpson ισχύει ο τύπος (4.26). Στην προκειμένη περίπτωση έχουμε $b = 1,\ a = 0$ και $f^{(4)}(x) = 4e^{x^2}(3 + 12x^2 + 4x^4)$. Ένα άνω φράγμα για το τελευταίο στο $[0, 1]$ βρίσκεται εύκολα, αφού $f^{(4)}(x) \leq 4e(3 + 12 + 4) \leq 207$. Έτσι για

$$\varepsilon_{ολ} \leq 0.0005, \quad \text{αρκεί} \quad \frac{h^4(b-a)f^{(4)}(\hat{\eta})}{180} \leq 0.0005, \quad \text{αρκεί} \quad \frac{h^4\, 207}{180} \leq 0.0005$$

ή ισοδύναμα

$$h^4 \leq \frac{180}{207} 0.0005 \Longleftrightarrow h \leq 0.1444$$

Αφού $2hn = (b - a)$, θα έχουμε $\frac{b-a}{2n} \leq 0.1444$, οπότε $n \geq 3.4626$ δηλαδή $n = 4$.

Με $n = 4$ χωρίζουμε το διάστημα $[0, 1]$ σε $2n$ μικρότερα διαστήματα, με τα σημεία $x_0 = 0, x_1 = 0.125, x_2 = 0.25, x_3 = 0.375, x_4 = 0.5, x_5 = 0.625, x_6 = 0.75, x_7 = 0.875, x_8 = 1$. Οι αντίστοιχες τιμές της συνάρτησης $f(x) = e^{x^2}$ είναι $f_0 = 1,\ f_1 = 1.01575, f_2 = 1.04649, f_3 = 1.15099, f_4 = 1.28403, f_5 = 1.4779, f_6 = 1.75505, f_7 = 2.15034, f_8 = 2.71828$. Τελικά από τον (4.19) έχουμε

$$\begin{aligned}
\int_0^1 e^{x^2} dx &= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_1 + 4f_2 + 4f_3 + 2f_4 + 4f_5 + 2f_6 + 4f_7 + f8) \\
&= \frac{0.25}{3}(1 + 4 \cdot 1.01575 + 2 \cdot 1.04649 + 4 \cdot 1.15099 + 2 \cdot 1.28403 \\
&+ 4 \cdot 1.4779 + 2 \cdot 1.75505 + 4 \cdot 2.15034 + 2.71828) \\
&= 1.46272
\end{aligned}$$

Η διαδικασία του προηγούμενου παραδείγματος δεν είναι και ο πλέον συνηθισμένος τρόπος για την εκτίμηση ενός ολοκληρώματος, λόγω του ότι η εύρεση φράγματος κάποιας τάξης κάποιας παραγώγου δεν είναι και από τις πλέον εύκολες διαδικασίες. Συνήθως ακολουθούμε την παρακάτω πρακτική.

Αρχικά υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα, διαλέγοντας κανόνα και πλήθος υποδιαστημάτων (συνήθως εκείνο του απλού κανόνα, οπότε είναι γνωστό το αρχικό h) και στη συνέχεια υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα εκ νέου υποδιπλασιάζοντας το h ή διπλασιάζοντας τον αριθμό των υποδιαστημάτων στα οποία χωρίσαμε το αρχικό διάστημα. Εάν η απόλυτη διαφορά των δυο τελευταίων τιμών των ολοκληρωμάτων που βρήκαμε είναι μικρότερη από κάποια δεδομένη ακρίβεια έστω ϵ, κρατάμε ως τιμή για το προς υπολογισμό ολοκλήρωμα την τελευταία τιμή που βρήκαμε, διαφορετικά υποδιπλασιάζουμε το καινούργιο h και συνεχίζουμε όπως και προηγουμένως.

Παράδειγμα 4.3 *Χρησιμοποιώντας τον κανόνα του Simson και τις λιγότερες το δυνατόν επαναλήψεις να υπολογίσετε με ακρίβεια τριών(3) δεκαδικών ψηφίων το ολοκλήρωμα*

$$I = \int_2^3 \frac{x}{\ln x}\, dx$$

Λύση Για τον επαναληπτικό προσδιορισμό του παραπάνω ολοκληρώματος αρχικά με $x_0 = 2$, $x_2 = 3$ και $h = 0.5$ υπολογίζουμε το

$$I_1 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{x}{\ln x}\, dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) = 2.75495$$

Επίσης με $x_0 = 2$, $x_4 = 3$ και $h = 0.25$ βρίσκουμε το

$$I_2 = \int_{x_0}^{x_4} \frac{x}{\ln x}\, dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f4) = 2.75376$$

Αφού $|I_2 - I_1| = 0.00119 > 0.0005$, συνεχίζουμε την διαδικασία με $x_0 = 2$, $x_8 = 3$ και $h = 0.125$, οπότε έχουμε το

$$I_3 = \int_{x_0}^{x_8} \frac{x}{\ln x}\, dx = \frac{h}{3}(f_0+4f_1+2f_2+4f_3+2f4+4f_5+2f_6+4f_7+f_8) = 2.75366$$

Αφού $|I_2 - I_1| = 0.00010 < 0.0005$, σταματάμε τη διαδικασία και θεωρούμε ότι $I = 2.75366$.

Παρατήρηση 4.2.3 *Προγραμματίζοντας κάποιος την παραπάνω διαδικασία θα πρέπει να λάβει υπόψη του ότι οι τιμές της συνάρτησης $f(x)$ στο βήμα i είναι γνωστές και διαθέσιμες και για το βήμα $(i+1)$, οπότε έχει να υπολογίσει μόνο τις καινούργιες τιμές των ενδιάμεσων σημείων. Κατ' αυτόν τον τρόπο το υπολογιστικό κόστος περιορίζεται στο μισό.*

4.3 Προσδιορίζοντας τους συντελεστές

Όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο έτσι κι εδώ η γραμμικότητα του τελεστή ολοκλήρωσης μας επιτρέπει να δημιουργήσουμε μόνοι μας τύπους για την εύρεση ενός ολοκληρώματος, απαιτώντας να είναι ακριβείς για όσο το δυνατόν μεγαλύτερου βαθμού πολυώνυμα. Δε θα περιγράψουμε πάλι την ίδια τεχνική, ωστόσο θα δώσουμε ένα παράδειγμα.

Παράδειγμα 4.4 *Να βρεθεί ο τύπος της μορφής*

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx h(af_0 + bf_1) + h^2(cf_0' + df_1') \tag{4.27}$$

Λύση Αφού οι άγνωστοι συντελεστές είναι τέσσερις, θα δημιουργήσουμε τέσσερις εξισώσεις. Ξεκινάμε με $f(x) = 1$. Από την (4.27) παίρνουμε

$$\int_{x_0}^{x_1} 1dx \approx h(af_0 + bf_1) + h^2(0c + 0d) \Longleftrightarrow a + b = 1 \tag{4.28}$$

Στη συνέχεια θεωρούμε ότι $f(x) = x$. Τώρα από την (4.27) και λαμβάνοντας υπόψη την (4.28) έχουμε

$$\int_{x_0}^{x_1} xdx \approx h(ax_0 + bx_1) + h^2(1c + 1d) \Longleftrightarrow b + c + d = \frac{1}{2} \tag{4.29}$$

Θεωρούμε τώρα ότι $f(x) = x^2$. Η (4.27) γίνεται

$$\int_{x_0}^{x_1} x^2dx = h(ax_0^2 + bx_1^2) + h^2(2x_0c + 2x_1d) \Longleftrightarrow$$

$$\frac{(x_0+h)^3 - x_0^3}{3} = h(ax_0^2 + b(x_0+h)^2) + h^2(2x_0c + 2(x_0+h)d) \Longleftrightarrow \tag{4.30}$$

$$b + 2d = \frac{1}{3}$$

Τέλος θεωρούμε ότι $f(x) = x^3$. Η (4.27) τώρα γίνεται

$$\int_{x_0}^{x_1} x^3 dx = h(ax_0^3 + bx_1^3) + h^2(3x_0^2c + 3x_1^2d) \iff$$

$$\frac{(x_0+h)^4 - x_0^4}{4} = h(ax_0^3 + b(x_0+h)^3) + h^2(3x_0^2c + 3(x_0+h)^2d) \iff \quad (4.31)$$

$$b + 3d = \frac{1}{4}$$

Λύνοντας το σύστημα των τεσσάρων εξισώσεων (4.28,4.29, 4.30,4.31) μπορούμε να βρούμε $a = \frac{1}{2}, b = \frac{1}{2}, c = \frac{1}{12}, d = -\frac{1}{12}$, οπότε έχουμε

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h^2}{12}(f_0' - f_1') \quad (4.32)$$

Είναι φανερό ότι ο τύπος που δημιουργήθηκε με τον παραπάνω τρόπο είναι ακριβής για πολυώνυμα μέχρι και τρίτου ($3^{ου}$) βαθμού τουλάχιστον.

4.4 Προγραμματίζοντας στον Ηλεκτρονικό Υπολογιστή

Για την εύρεση του ολοκληρώματος αριθμητικά θα χρησιμοποιήσουμε τον κανόνα του Simpson και ο αναγνώστης ως άσκηση να κάνει το ίδιο για τους άλλους κανόνες ή τύπους. Τα δεδομένα για το πρόβλημά μας είναι η συνάρτηση $f(x)$, τα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης a και b και η ακρίβεια ϵ. Αρχικά χρησιμοποιούμε τον τύπο (4.18), δηλαδή $n = 2$ και $h = \frac{b-a}{n}$. Στη συνέχεια διπλασιάζουμε το n κάνοντάς το 4, οπότε το $h = \frac{b-a}{n}$ υποδιπλασιάζεται και χρησιμοποιούμε τον τύπο (4.19). Συγκρίνουμε την απόλυτη τιμή της διαφοράς των δυο ποσοτήτων που βρήκαμε με εκείνη του ϵ και εάν αυτή είναι μικρότερη, κρατάμε ως τιμή για το ολοκλήρωμα την τελευταία που βρήκαμε, αλλιώς συνεχίζουμε τη διαδικασία διπλασιάζοντας το n κ.λ.π.. Εκείνο που θα παρατηρούσε κάποιος στη διαδικασία είναι ότι οι τιμές των άκρων του διαστήματος εμφανίζονται κάθε φορά στους τύπους, επομένως θα πρέπει να υπολογίζονται εφάπαξ. Οι υπόλοιπες τιμές της συνάρτησης f χωρίζονται σε τιμές των σημείων με άρτιους δείκτες (άρτιες τιμές (f_even)) και σε τιμές των σημείων με περιττούς δείκτες (περιττές τιμές (f_odd)). Εκείνες των περιττών δεικτών πολλαπλασιάζονται με 4, ενώ εκείνες των αρτίων δεικτών πολλαπλασιάζονται με 2. Κάθε φορά σε μια καινούργια επανάληψη άρτιες και περιττές τιμές γίνονται άρτιες (f_even=f_even+f_odd) και όλες οι καινούργιες τιμές είναι οι περιττές.

Παράδειγμα 4.5 *Χρησιμοποιώντας τον κανόνα του Simson και τις λιγότερες το δυνατόν επαναλήψεις να υπολογίσετε με ακρίβεια τεσσάρων(4) δεκαδικών ψηφίων το ολοκλήρωμα:*

$$\int_1^2 \frac{e^x}{\ln(x+1)}\, dx$$

Λύση Το πρόβλημα θα το λύσουμε δημιουργώντας δυο αρχεία στον τρέχοντα υποκατάλογο του matlab. Το πρώτο αρχείο θα περιέχει την συνάρτηση και θα το ονομάσουμε f.m

```
function y=f(x)
y=exp(x)/log(x+1);
```

Το δεύτερο αρχείο θα περιέχει το πρόγραμμα και θα το ονομάσουμε Simpson.m

```
e=0.00005;
a=1;
b=2;
n=2;
f_ab=f(a)+f(b);
f_odd=f((a+b)/2);
f_even=0;
s_new=(f_ab+4*f_odd)*(b-a)/6;
s_old=s_new+1;
k=1;
while abs(s_new-s_old)>e
  s_old=s_new;
  n=2*n;
```

```
    h=(b-a)/n;
    x=a:h:b; %Epanaprosdiorizoume ta shmeia x.
    f_even=f_even+f_odd; %Upologizoume to ajroisma stic
    f_odd=0;             % artiec theseis.
    for i=2:2:n
       f_odd=f_odd+f(x(i)); %Upologizoume to athroisma
    end                     %stic perittes theseic.
    s_new=(f_ab+4*f_odd+2*f_even)*h/3; %Upologizoume
    k=k+1;                             %to oloklirwma.
  end
```

Τρέχουμε το πρόγραμμα με το όνομά του (Simpson) και βλέπουμε την τιμή του ολοκληρώματος με το όνομα (s_new). Το k μας δίνει τον αριθμό των επαναλήψεων.

Ασκήσεις

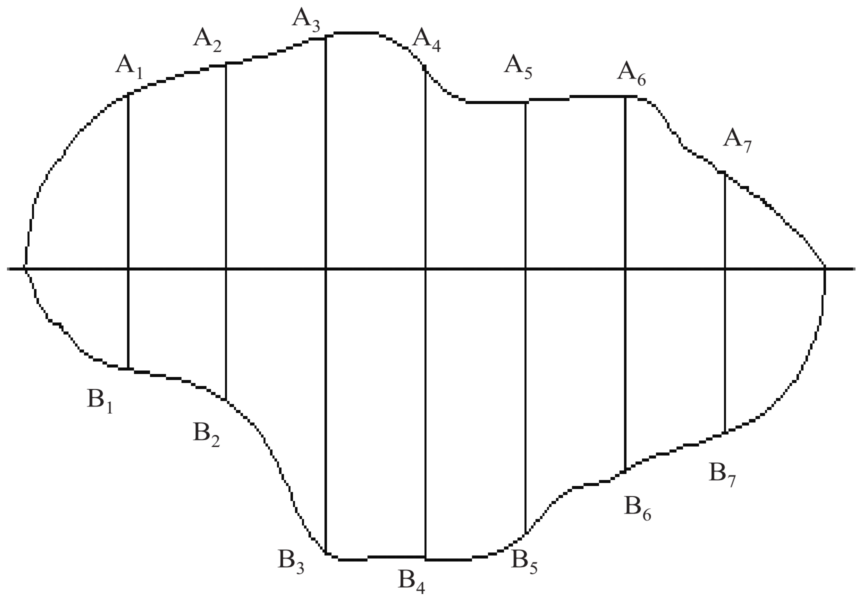
Άσκηση 4.1 *Να λύσετε το πρόβλημα του παραδείγματος (4.2) για τον κανόνα α) τραπεζίου, β) ορθογωνίου*

Άσκηση 4.2 *Μια ομάδα φοιτητών προκειμένου να βρει το εμβαδόν του έλους του σχήματος (4.5) το χώρισε σε οχτώ τμήματα πλάτους* $10m$. *Στον επόμενο πίνακα φαίνεται το μήκος κάθε ευθυγράμμου τμήματος* $A_iB_i,\ i = 1(n)n$.

ευθύγραμμα τμήμα	A_1B_1	A_2B_2	A_3B_3	A_4B_4	A_5B_5	A_6B_6	A_7B_7
μήκος τμήματος	23	27	43	41	38	35	28

Στη συνέχεια χρησιμοποίησε τον κανόνα του Simson. Κάντε το ίδιο.

Άσκηση 4.3 *Να βρεθεί η τάξη του σφάλματος στο γενικευμένο κανόνα του ορθογωνίου ακολουθώντας μια τακτική ίδια με εκείνη που ακολουθήσαμε στον κανόνα του τραπεζίου.*



Σχήμα 4.5: Έλος χωρισμένο σε οκτώ τμήματα

Άσκηση 4.4 *Να αποδείξετε χρησιμοποιώντας κατάλληλο τύπο παρεμβολής τον κανόνα του ορθογωνίου. Βρείτε έκφραση για το σφάλμα.*

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx h \cdot f_1$$

Άσκηση 4.5 *Να ερμηνεύσετε γεωμετρικά τον κανόνα του ορθογωνίου τόσο του τύπου (4.7) όσο και εκείνον της άσκησης (4.4).*

Άσκηση 4.6 *Να αποδειχθεί ότι για κάθε πολυώνυμο τρίτου βαθμού ισχύει*

$$\int_a^b P_3(x)\,dx = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{b+a}{2}) + f(b))$$

Άσκηση 4.7 *α)Να αποδείξετε χρησιμοποιώντας κατάλληλα τον τύπο του τραπεζίου (Πολλαπλασιάστε με $\frac{1}{3}$) και εκείνον της άσκησης (4.8) (Πολλαπλασιάστε με $\frac{2}{3}$) τον κανόνα του Simpson.*

Άσκηση 4.8 *Να αποδείξετε ότι ισχύει*

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2})$$

Άσκηση 4.9 *Να αποδείξετε ότι για το σφάλμα της προηγούμενης άσκησης (4.8) ισχύει*

$$\varepsilon = (b-a)f(\frac{a+b}{2}) - \int_a^b f(x)\,dx = -\frac{h^3 f''(\xi)}{24}, \quad \text{με } \xi \in (a,b)$$

χρησιμοποιώντας την τεχνική που αναπτύχθηκε για την εκτίμηση του σφάλματος του κανόνα του Simpson ή οποιονδήποτε άλλον τρόπο.

Άσκηση 4.10 *Υπολογίστε την κάθετη διατομή ενός ποταμού πλάτους 10 μέτρων από τα παρακάτω στοιχεία χρησιμοποιώντας κατάλληλα το γενικευμένο κανόνα α)του τραπεζίου β)του Simpson.*

απόστ. από την ακτή	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
βάθος σε μέτρα	0.2	0.4	0.7	1.3	1.5	1.7	1.4	1.2	0.9	0.5	0.1

Άσκηση 4.11 *Να δημιουργήσετε το γενικευμένο τύπο υπολογισμού ολοκληρώματος του (4.32) και να τον χρησιμοποιήσετε για να υπολογίσετε το ολοκλήρωμα*

$$\int_2^3 \frac{e^x}{ln(x+1)}dx$$

με ακρίβεια τεσσάρων (4) δεκαδικών ψηφίων. Κάντε το ίδιο με τον κανόνα του Simpson. Τι παρατηρείτε;

Προσέγγιση συναρτήσεων

5.1 Γενικά

Έχουμε ήδη δει το πώς προσεγγίζουμε τις $n+1$ τιμές μιας συνάρτησης με ένα πολυώνυμο n βαθμού. Επίσης τονίστηκε ότι αυτός δεν είναι πάντα ο καλύτερος τρόπος για να προσεγγίσουμε τα πειραματικά μας δεδομένα ή αποτελέσματα. Στο επόμενο παράδειγμα δίνονται τέσσερα(4) σημεία (παρατηρήσεις) και ζητείται να βρεθεί το καλύτερο πολυώνυμο που προσεγγίζει αυτά. Προφανώς με τη θεωρία που γνωρίζουμε μέχρι εδώ, το καλύτερο πολυώνυμο θα ήταν ένα πολυώνυμο $3^{ου}$ βαθμού, το οποίο θα διέρχεται απ' όλα τα σημεία.

Παράδειγμα 5.1 *Να βρεθεί το καλύτερο πολυώνυμο που προσεγγίζει τα σημεία*

x	-1	0.9	1.1	3
f	4	2.499	1.501	0

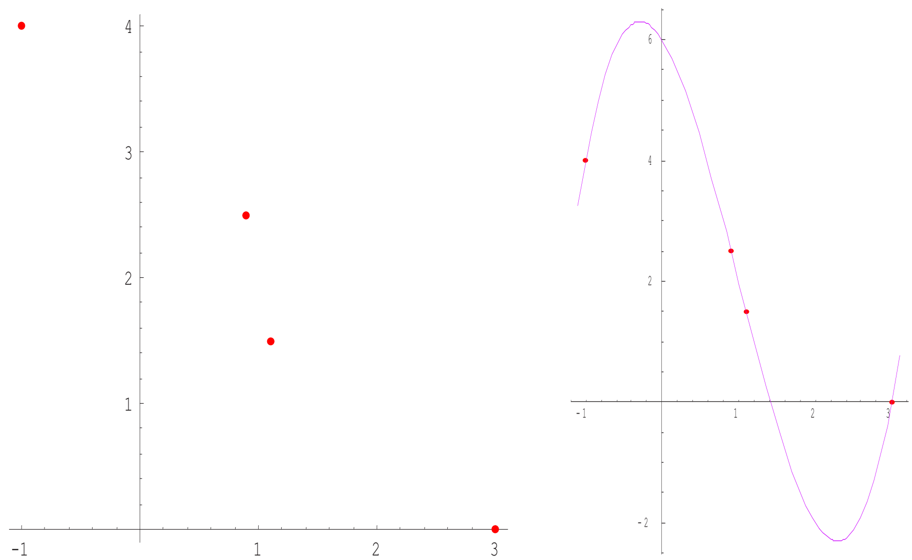
Να γίνει η γραφική παράσταση αυτού.

Λύση Αφού τα σημεία δεν είναι ισαπέχοντα, με το πολυώνυμο του Langrange βρίσκουμε

$$f(x) = \sum_{i=0}^{3} \frac{\prod_{j=0,j\neq i}^{3}(x-x_j)}{\prod_{j=0,j\neq i}^{3}(x_i-x_j)} f(x_i) = \cdots = x^3 - 3x^2 - x + 1$$

Η Γραφική παράσταση των τεσσάρων σημείων καθώς και του παραπάνω πολυωνύμου φαίνεται στο σχήμα (5.6)

Από το σχήμα όμως φαίνεται ότι πολύ πιθανόν η συνάρτηση $f(x)$ να μην είναι και η πλέον κατάλληλη για να περιγράψει το παραπάνω πείραμα. Θα μπορούσε κάποιος να ισχυρισθεί ότι τα παραπάνω σημεία μάλλον περιγράφονται καλύτερα από μια ευθεία γραμμή (πολυώνυμο $1^{ου}$ βαθμού), παρά από ένα πολυώνυμο $3^{ου}$



Σχήμα 5.6: Η γραφική παράσταση των τεσσάρων σημείων και της $f(x)$

βαθμού. Το ότι δε βρίσκονται ακριβώς πάνω σε ευθεία γραμμή θα μπορούσε να ερμηνευθεί από το γεγονός ότι αυτό οφείλεται σε σφάλματα των μετρήσεων ή των οργάνων. Το ερώτημα που θα μπορούσε να διατυπώσει κάποιος είναι: «Αν δεχθούμε ότι τα σημεία αυτά προσεγγίζονται καλύτερα από μια ευθεία γραμμή, με ποιο τρόπο θα μπορούσαμε να την προσδιορίσουμε;» Στο ερώτημα αυτό θα απαντήσουμε στην επόμενη παράγραφο.

5.2 Η Ευθεία των ελαχίστων τετραγώνων

Έστω $(x_i, f_i),\ i = 1(1)n$ τα n σημεία, τα οποία κατά την άποψή μας βρίσκονται σε ευθεία και προσεγγίζονται από την

$$y = ax + b. \tag{5.1}$$

Προφανώς οι συντεταγμένες των σημείων που προσεγγίζουν τα προηγούμενα μέσα από την ευθεία είναι τα $(x_i, y_i),\ i = 1(1)n$ (Στην πραγματικότητα αληθείς τιμές θεωρούνται αυτές της ευθείας και προσεγγιστικές εκείνες των σημείων).

Το σφάλμα που κάνουμε στην προσέγγιση αυτή για κάθε σημείο είναι

$$\varepsilon_i = f_i - y_i,\ i = 1(1)n. \tag{5.2}$$

Ένα κριτήριο για να δεχτούμε την προσέγγιση αυτή ως «καλύτερη» θα ήταν η ελαχιστοποίηση αυτών των σφαλμάτων. Η προσπάθεια να ελαχιστοποιήσουμε συγχρόνως όλα αυτά τα σφάλματα (5.2) θα ήταν μάταιη! Όμως μια καλή ιδέα θα ήταν να ελαχιστοποιήσουμε το άθροισμα των τετραγώνων τους, αφού κάτι τέτοιο θα μας έπειθε ότι συνολικά αυτά μειώνονται. Έτσι το πρόβλημα ανάγεται στο να βρούμε τις τιμές των a και b, οι οποίες ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (f_i - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (f_i - ax_i - b)^2 \tag{5.3}$$

Είναι γνωστό από τα Μαθηματικά ([10]) ότι μιλάμε για τις τιμές των a και b που μηδενίζουν τις πρώτες μερικές παραγώγους της E, δηλαδή τις E_a και E_b. Έτσι μιλάμε για τη λύση του συστήματος

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \frac{\partial E}{\partial a} & = & 0 \\ \\ \frac{\partial E}{\partial b} & = & 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{lcl} -2\sum_{i=1}^{n}(f_i - ax_i - b)x_i & = & 0 \\ \\ -2\sum_{i=1}^{n}(f_i - ax_i - b) & = & 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i & = & \sum_{i=1}^{n} f_i x_i \\ \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb & = & \sum_{i=1}^{n} f_i \end{array} \right. \tag{5.4}$$

Η λύση του παραπάνω συστήματος (5.4) μας δίνει τα ζητούμενα a και b. Το ότι οι τιμές των a και b ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση του σφάλματος (5.3) μπορεί να το δει κανείς μέσα από τις συνθήκες δεύτερης τάξης ([10]). Πράγματι,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial a^2} \ = \ 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \ > \ 0$$

Επίσης και

$$\frac{\partial^2 E}{\partial a^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial b^2} - (\frac{\partial^2 E}{\partial a \partial b})^2 = \cdots = n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2 \ > \ 0$$

αφού το τελευταίο προκύπτει άμεσα από την ανισότητα του Schwarz $|x^T \cdot y| \leq \|x\|\|y\|$ ([7]), αν πάρουμε ως διανύσματα τα $x = (x_1\ x_2\ \ldots x_n)^T$ και $y = (1\ 1\ 1 \ldots 1)^T$.

Παράδειγμα 5.2 *Να βρεθεί το πρωτοβάθμιο πολυώνυμο που προσεγγίζει τα σημεία*

x	-1	0.9	1.1	3
f	4	2.499	1.501	0

Να γίνει η γραφική παράσταση αυτού.

Λύση Για την εύρεση του πρωτοβάθμιου αυτού πολυωνύμου πρέπει να προσδιορίσουμε τους συντελεστές του συστήματος (5.4). Προκειμένου να κερδίζουμε κόπο και χρόνο, καλό θα είναι να συστηματοποιούμε και να οργανώνουμε τη δουλειά μας. Προτείνουμε την οργάνωση στον παρακάτω πίνακα.

i	x_i	f_i	x_i^2	$x_i f_i$
1	-1	4	1	-4
2	0.9	2.499	0.81	2.2491
3	1.1	1.501	1.21	1.6511
4	3	0	9	0
Αθροίσματα	4	8	12.02	-0.0998

Είναι τώρα φανερό ότι το σύστημά μας είναι το

$$\left\{\begin{array}{rcl} 12.02a + 4b & = & -0.0998 \\ \\ 4a + 4b & = & 8 \end{array}\right. \tag{5.5}$$

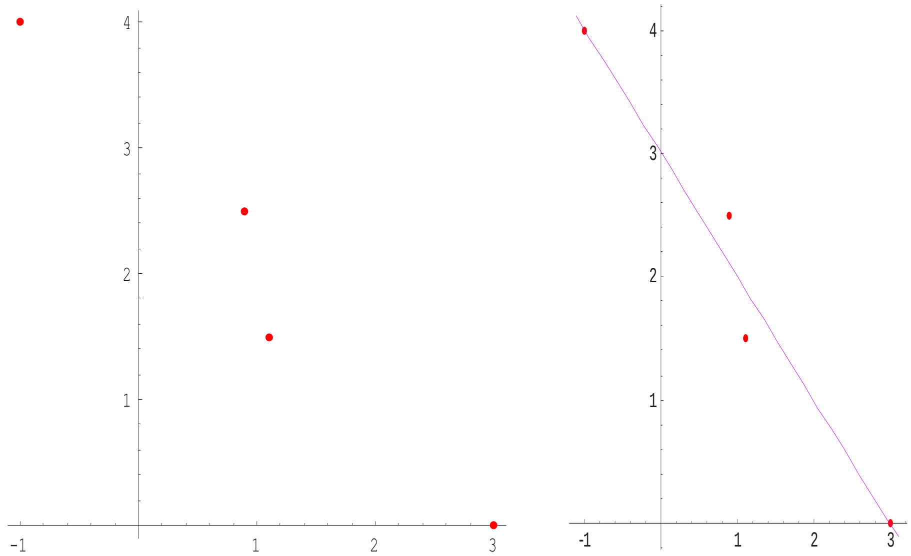
Λύνοντας το παραπάνω σύστημα με οποιονδήποτε τρόπο (π.χ. με ορίζουσες) βρίσκουμε $D = 32.08$, $D_a = -32.3992$, $D_b = 96,5592$ και $a = -1.0100$, $b = 3.0100$. Έτσι η ζητούμενη ευθεία είναι η $y = -1.01x + 3.01$. Μπορεί πλέον να παρατηρήσει κάποιος στο σχήμα (5.7) ότι τα σημεία προσεγγίζονται πολύ καλύτερα με την ευθεία παρά με το πολυώνυμο $3^{ου}$ βαθμού του σχήματος (5.6).

5.3 Η Εκθετική των ελαχίστων τετραγώνων

Πολλές φορές πάλι η γραφική παράσταση του πίνακα τιμών της συνάρτησης μας οδηγεί στο να σκεφτούμε ότι η συνάρτησή μας πιθανόν να έχει τη μορφή

$$y = ce^{ax} \ (i) \ \text{ ή } \ y = cx^a \ (ii). \tag{5.6}$$

Η απευθείας χρήση της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων δημιουργεί προβλήματα. Για το λόγο αυτό, πριν χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδό μας, λογαριθμούμε



Σχήμα 5.7: Η γραφική παράσταση των τεσσάρων σημείων και της ευθείας

τις σχέσεις μας. Έτσι έχουμε

$$\ln y = ax + \ln c \ (i) \quad \text{ή} \quad \ln y = a \ln x + \ln c \ (ii). \tag{5.7}$$

Αν δε θέσουμε $\hat{y} = \ln y$, $\hat{x} = \ln x$ και $b = \ln c$, προκύπτουν οι σχέσεις

$$\hat{y} = ax + b \ (i) \quad \text{ή} \quad \hat{y} = a\hat{x} + b \ (ii). \tag{5.8}$$

Παρατηρούμε ότι οι σχέσεις (5.8) είναι όμοιες με εκείνες της (5.1). Εκείνο που πρέπει να προσέξουμε τώρα είναι το ότι τα $\hat{x}$ και $\hat{y}$ δεν προσεγγίζουν τις τιμές των x_i και f_i αντίστοιχα, αλλά εκείνες των $\ln x_i$ και $\ln f_i$. Η εύρεση των a και b ακολουθεί τη διαδικασία της προηγούμενης παραγράφου και όπου χρειάζεται απολογαριθμοποιούμε!

Παράδειγμα 5.3 *Ο θεωρητικός τύπος που εκφράζει τη μεταβολή της ποσότητας κάποιου είδους ρύπου, μετά την επιβολή ενός φίλτρου, συναρτήσει του χρόνου είναι $Q(t) = kL^t$. Μια ομάδα φοιτητών προσέγγισε τα πειραματικά δεδομένα του διπλανού πίνακα με «ελάχιστα τετράγωνα» επιλέγοντας έναν από τους δύο επόμενους τύπους $q = at + b$ ή $q = e^{at+b}$. α) Να βρήτε τα a και b του σωστού τύπου που χρησιμοποίησαν οι φοιτητές β) Να βρείτε τις σταθερές k και L του θεωρητικού τύπου για το συγκεκριμένο πρόβλημα.*

t_i	Q_i
0,25	6,050
0,5	4,953
0,75	4,055
1	3,320
1,25	2,718
1,5	2,226
1,75	1,822
2	1,492

Λύση Αφού ο θεωρητικός τύπος είναι εκθετικός, οι φοιτητές επέλεξαν τον τύπο $q = e^{at+b}$. Έτσι λογαριθμίζοντας έχουμε

$$q = e^{at+b} \Longleftrightarrow \ln q = at + b \Longleftrightarrow \hat{q} = at + b$$

Εκείνο που πρέπει να προσέξουμε είναι ότι το $\hat{q}$ προσεγγίζει τις τιμές $\hat{q}_i = \ln Q_i,\ i = 1(1)8$. Για τη διευκόλυνσή μας δημιουργούμε τον πίνακα

i	t_i	Q_i	$\hat{q}_i = \ln Q_i$	t_i^2	$t_i\hat{q}_i$
1	0.25	6.05	1.8001	0.0625	0.4500
2	0.5	4.653	1.5375	0.2500	0.7688
3	0.75	4.055	1.4000	0.5625	1.0500
4	1	3.32	1.2000	1.0000	1.2000
5	1.25	2.718	0.9999	1.5625	1.2499
6	1.5	2.226	0.8002	2.2500	1.2003
7	1.75	1.822	0.5999	3.0625	1.0499
8	2	1.492	0.4001	4.0000	0.8002
Αθροίσματα	9		8.7377	12.7500	7.7691

Το σύστημα (5.4) που πρέπει να λύσουμε διαμορφώνεται ως εξής:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} a\sum_{i=1}^n t_i^2 + b\sum_{i=1}^n t_i & = & \sum_{i=1}^n t_i\hat{q}_i \\ \\ a\sum_{i=1}^n t_i + nb & = & \sum_{i=1}^n \hat{q}_i \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} 12.75a + 9b & = & 7.7691 \\ 9a + 8b & = & 8.7377 \end{array} \right.$$

Χρησιμοποιώντας τις ορίζουσες αρχικά βρίσκουμε $D = 21$, $D_a = -16.4865$ και $D_b = 41.4838$, οπότε $a = -0.7851$ και $b = 1.9754$. Έτσι ο τύπος που βρήκαν οι φοιτητές ήταν $q(t) = e^{-0.7851t+1.9754}$. Τέλος, εύκολα μπορεί τώρα κάποιος να δώσει τις σταθερές του προσεγγιστικού τύπου ως εξής

$$q(t) = e^{-0.7851t+1.9754} = e^{1.9754}(e^{-0.7851})^t = 7.2095 \cdot 0.4561^t =: kL^t.$$

5.4 Η Παραβολή των ελαχίστων τετραγώνων

Η λογική που αναπτύχθηκε στις δυο προηγούμενες παραγράφους μπορεί να αναπτυχθεί για κάθε πολυώνυμο βαθμού $m < (n-1)$, όπου n είναι ο αριθμός των σημείων που προσεγγίζουμε. Ωστόσο το σύστημα που καλούμαστε τελικά να λύσουμε για να βρούμε τους συντελεστές του πολυωνύμου, παρόλο που αποδεικνύεται ότι έχει πάντα μοναδική λύση, δεν είναι «ευσταθές» για $m > 7$, με αποτέλεσμα να δημιουργούνται προβλήματα στη λύση του ([12], [3]). Στη συνέχεια θα σκιαγραφήσουμε τη μέθοδο με ένα παράδειγμα.

Παράδειγμα 5.4 *Μια ομάδα φοιτητών προσέγγισε τα πειραματικά δεδομένα του διπλανού πίνακα με «ελάχιστα τετράγωνα» επιλέγοντας ως τύπο την παραβολή ($f(x) = ax^2 + bx + c$). α) Να βρείτε τα a, b και c του τύπου που χρησιμοποίησαν οι φοιτητές β) Να γίνει η γραφική παράσταση της συνάρτησης και των σημείων στο ίδιο σύστημα αξόνων.*

x_i	f_i
0	1
0.25	0.9
0.5	0.7
0.75	0.9
1	1.2
1.25	1.4
1.5	1.7
1.75	2.4
2	3

Λύση Θεωρούμε τη συνάρτηση

$$y(x) = ax^2 + bx + c, \tag{5.9}$$

η οποία προσεγγίζει τις τιμές του πίνακά μας. Για να εφαρμόσουμε τη θεωρία των ελαχίστων τετραγώνων, θεωρούμε τη συνάρτηση

$$E(a,b,c) = \sum_{i=1}^{9}(f_i - y(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{9}(f_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2 \tag{5.10}$$

Για την εύρεση των τιμών των παραμέτρων a, b και c δημιουργούμε και λύνουμε το σύστημα

$$\left\{\begin{array}{lcl} \frac{\partial E}{\partial a} & = & 0 \\ \frac{\partial E}{\partial b} & = & 0 \\ \frac{\partial E}{\partial c} & = & 0 \end{array}\right. \Leftrightarrow \left\{\begin{array}{lcl} -2\sum_{i=1}^{9}(f_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i^2 & = & 0 \\ -2\sum_{i=1}^{9}(f_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i & = & 0 \\ -2\sum_{i=1}^{9}(f_i - ax_i^2 - bx_i - c) & = & 0 \end{array}\right. \Leftrightarrow$$

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{9} x_i^4 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^2 & = & \sum_{i=1}^{9} f_i x_i^2 \\ a\sum_{i=1}^{9} x_i^3 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{n} x_i & = & \sum_{i=1}^{9} f_i x_i \\ a\sum_{i=1}^{9} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i + 9c & = & \sum_{i=1}^{9} f_i \end{cases} \tag{5.11}$$

Για διευκόλυνση στις πράξεις δημιουργούμε τον παρακάτω πίνακα

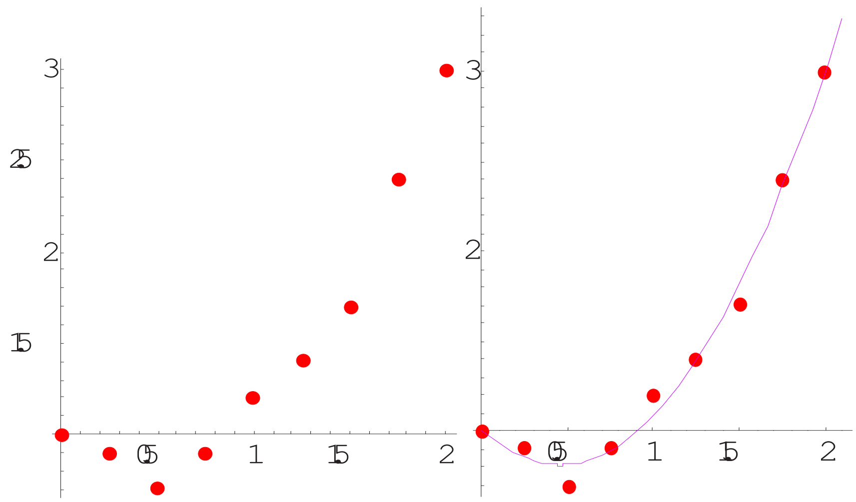
i	x_i	f_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$f_i x_i$	$f_i x_i^2$
1	0	1	0	0	0	0	0
2	0.25	0.9	0.0625	0.015625	0.00390625	0.225	0.05625
3	0.5	0.7	0.25	0.125	0.0625	0.35	0.175
4	0.75	0.9	0.5625	0.421875	0.31640625	0.675	0.50625
5	1	1.2	1	1	1	1.2	1.2
6	1.25	1.4	1.5625	1.953125	2.44140625	1.75	2.1875
7	1.5	1.7	2.25	3.375	5.0625	2.55	3.825
8	1.75	2.4	3.0625	5.359375	9.37890625	4.2	7.35
9	2	3	4	8	16	6	12
Αθροίσματα	9	13.2	12.75	20.25	34.265625	16.95	27.3

Έτσι το σύστημα (5.11) γίνεται

$$\begin{cases} 34.265625a + 20.25b + 12.75c & = & 27.3 \\ 20.25a + 12.75b + 9c & = & 16.95 \\ 12.75a + 9b + 9c & = & 13.2 \end{cases},$$

η λύση του οποίου μας δίνει $a = 0.9143$, $b = 0.8286$ και $c = 1$. Για τη γραφική παράσταση των σημείων και της συνάρτησης στο ίδιο σύστημα αξόνων «τρέχουμε» το παρακάτω πρόγραμμα στο « Mathematica»

```
Clear[g, x];
t1 = Table[{{0, 1}, {0.25, 0.9}, {0.5, 0.7}, {0.75, 0.9},
       {1., 1.2}, {1.25, 1.4}, {1.5, 1.7}, {1.75, 2.4}, {2., 3.}}];
p1 = ListPlot[t1, AspectRatio -> Automatic,
     PlotStyle -> {Hue[0.0], PointSize[0.04]}];
```



Σχήμα 5.8: Παραβολή – Προσέγγιση

```
g[x_] = 0.9143x^2 - 0.8286x + 1;
p2 = Plot[g[x], {x, 0, 2.1}, PlotRange -> {0.5, 3},
     AspectRatio -> Automatic, PlotStyle -> Hue[0.8]];
Show[p1, p2];
```

Στο σχήμα (5.8) φαίνεται η πολύ καλή προσέγγιση που επιτυγχάνεται στα σημεία που δόθηκαν.

5.5 Προσέγγιση με συναρτήσεις

Μέχρι εδώ η προσέγγιση μελετήθηκε (ή η μελέτη σχολιάστηκε) με γραμμικά ανεξάρτητα πολυώνυμα, τα $\{1, x, x^2, \cdots, x^m\}$, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Ωστόσο κάποιος θα μπορούσε να εργαστεί με τον ίδιο τρόπο με οποιοδήποτε σύνολο γραμμικά ανεξάρτητων συναρτήσεων. Έτσι μπορεί κάποιος να χρησιμοποιήσει ως σύνολο, κάποιο σύνολο τριγωνομετρικών συναρτήσεων π.χ.

$$\{1, \cos x, \cos 2x, \cdots, \cos mx\}$$

ή ένα σύνολο εκθετικών συναρτήσεων π.χ.

$$\{1, e^{\lambda_1 x}, e^{\lambda_2 x}, \cdots, e^{\lambda_m x}, \}$$

Παράδειγμα 5.5 *Για να προσεγγίσετε τις παρατηρήσεις που περιγράφονται στο διπλανό πίνακα, όπου η πρώτη στήλη περιέχει το x και η δεύτερη το y, να χρησιμοποιήσετε μια συνάρτηση της μορφής $f(x) = ax + b$ και μια συνάρτηση της μορφής $g(x) = ax + b\sqrt{x}$. Ποια θα χρησιμοποιούσατε για να προβλέψετε το y, όταν το x είναι 12; Δικαιολογήστε την απάντησή σας.*

x_i	y_i
0	0
1	-0.5
4	1
9	4.5

Λύση Για την εύρεση των συντελεστών a και b της συνάρτησης $f(x)$ χρειάζεται να λύσουμε το σύστημα (5.4). Για την εύρεση των συντελεστών και των σταθερών όρων αυτού έχουμε:

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	0	0	0	0
2	1	-0.5	1	-0.5
3	4	1	16	4
4	9	4.5	81	40.5
Αθροίσματα	14	5	98	44

Είναι τώρα φανερό ότι το σύστημά μας είναι το

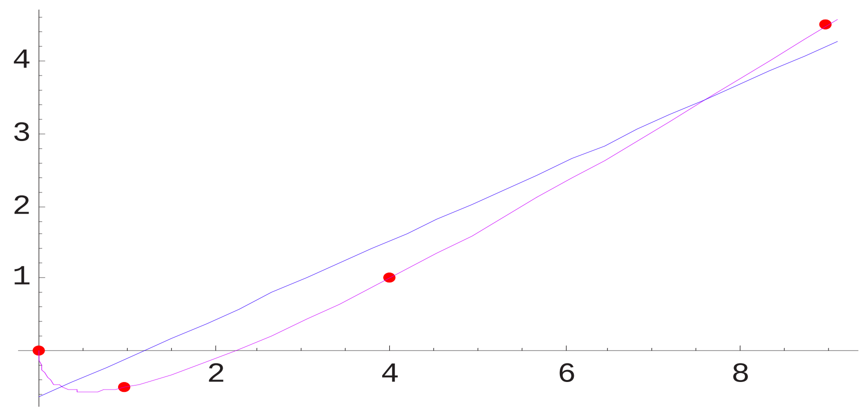
$$\begin{cases} 98a + 14b = 44 \\ \\ 14a + 4b = 5 \end{cases}$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα με οποιονδήποτε τρόπο βρίσκουμε $a = 0.5408$ και $b = -0.6429$. Έτσι η ζητούμενη ευθεία είναι η $y = 0.5408x - 0.6429$.
Για την εύρεση των συντελεστών a και b της συνάρτησης $g(x)$ χρειάζεται να θεωρήσουμε τη συνάρτηση

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^{4}(y_i - g(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{4}(y_i - ax_i - b\sqrt{x_i})^2$$

Δημιουργούμε και λύνουμε το σύστημα

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a} = 0 \\ \\ \frac{\partial E}{\partial b} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} -2\sum_{i=1}^{4}(y_i - ax_i - b\sqrt{x_i})x_i = 0 \\ \\ -2\sum_{i=1}^{4}(y_i - ax_i - b\sqrt{x_i})\sqrt{x_i} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow$$



Σχήμα 5.9: Προσέγγιση με ευθεία και γραμμικά ανεξάρτητες συναρτήσεις

$$\left\{\begin{array}{rcl} a\sum_{i=1}^{4}x_i^2 + b\sum_{i=1}^{4}x_i\sqrt{x_i} & = & \sum_{i=1}^{4}y_ix_i \\ \\ a\sum_{i=1}^{4}x_i\sqrt{x_i} + b\sum_{i=1}^{4}x_i & = & \sum_{i=1}^{4}y_i\sqrt{x_i} \end{array}\right. \tag{5.12}$$

Για την εύρεση των συντελεστών και των σταθερών όρων του συστήματος (5.12) έχουμε

i	x_i	y_i	x_i^2	$\sqrt{x_i}$	$x_i\sqrt{x_i}$	x_iy_i	$y_i\sqrt{x_i}$
1	0	0	0	0	0	0	0
2	1	$-0,5$	1	1	1	$-0,5$	$-0,5$
3	4	1	16	2	8	4	2
4	9	$4,5$	81	3	27	$40,5$	$13,5$
Αθροίσματα	14	5	98	6	36	44	15

οπότε το προς λύση σύστημα διαμορφώνεται ως εξής

$$\left\{\begin{array}{rcl} 98a + 36b & = & 44 \\ \\ 36a + 14b & = & 15 \end{array}\right.$$

Η λύση του παραπάνω συστήματος μας δίνει ότι $a = 1$ και $b = -\frac{3}{2}$, οπότε βρίσκουμε ότι $g(x) = x - \frac{3}{2}\sqrt{x}$. Από το σχήμα (5.9) κάποιος μπορεί να δει και στη συνέχεια να επαληθεύσει, ότι η συνάρτηση $g(x)$ είναι η ακριβής συνάρτηση η οποία διέρχεται από τα παραπάνω σημεία. Έτσι είναι λογικό να τη δεχθεί ως συνάρτηση πρόβλεψης, οπότε $g(12) = 6.80$. Ωστόσο δε θα ήταν λάθος κάποιος να ισχυριστεί ότι ως συνάρτηση πρόβλεψης θεωρεί εκείνη της ευθείας, επειδή τα σημεία βρίσκονται περίπου σε ευθεία γραμμή και κάποιες αποκλίσεις οφείλονται σε σφάλματα μετρήσεων. Η προβλεπόμενη τιμή $f(12) = 5.84$ δεν απέχει πολύ από την προηγούμενη.

5.6 Προσέγγιση συναρτήσεων

Μέχρι εδώ προσεγγίσαμε συναρτήσεις που ήταν γνωστές οι τιμές τους σε κάποια σημεία με άλλες συναρτήσεις (π.χ. πολυώνυμα). Ωστόσο δεν είναι λίγες οι φορές που θα πρέπει να προσεγγίσουμε συνεχείς συναρτήσεις που είναι γνωστός ο τύπος τους με πολυώνυμα, αφού αυτά έχουν, όπως έχουμε πει, πολύ καλή συμπεριφορά. Στην περίπτωση αυτή ουσιαστικά έχουμε ένα άπειρο πλήθος σημείων που θα πρέπει να προσεγγίσουμε. Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων που περιγράφτηκε παραπάνω συνεχίζει να ισχύει, με τη διαφορά ότι το άθροισμα αντικαθίσταται πλέον από το ολοκλήρωμα. Έτσι αν θεωρήσουμε ότι έχουμε τη συνάρτηση $f(x),\ x \in [a,b]$ και θέλουμε να την προσεγγίσουμε με ένα πολυώνυμο βαθμού το πολύ m π.χ. το $P_m(x) = a_m x + a_{m-1}x + \cdots + a_0$, αποδεικνύεται ότι αυτό το πολυώνυμο υπάρχει και είναι μοναδικό. Το σφάλμα που γίνεται σε κάθε σημείο $x_i\ \in [a,b]$ είναι $\varepsilon_i = f(x_i) - P_m(x_i)$, ενώ το συνολικό του τετραγώνου του σφάλματος σ' ολόκληρο το διάστημα $[a,b]$ είναι

$$E(a_m, a_{m-1}, \cdots, a_0) = \int_a^b (f(x) - P_m(x))^2 dx = \int_a^b (f(x) - a_m x - a_{m-1}x - \cdots - a_0)^2 dx$$

Η ελαχιστοποίηση της $E(a_m, a_{m-1}, \cdots, a_0)$ πετυχαίνεται με την εύρεση των συντελεστών $\{a_m, a_{m-1}, \cdots, a_0\}$, για τους οποίους ισχύουν

$$E_{a_i}(a_m, a_{m-1}, \cdots, a_0) = 0, \quad i = 0(1)m \tag{5.13}$$

Αφού τόσο η συνάρτηση $(f(x) - P_m(x))^2$, όσο και οι συναρτήσεις $\frac{\partial}{\partial a_i}(f(x) - P_m(x))^2$ είναι συνεχείς συναρτήσεις ([2]), οι σχέσεις (5.13) μας δίνουν το σύστημα

$$\sum_{i=0}^{m} a_i \int_a^b x^{i+j} dx = \int_a^b x^j f(x) dx, \quad j = 0(1)m \tag{5.14}$$

Η επίλυση του παραπάνω συστήματος μας δίνει τους συντελεστές του πολυωνύμου που προσεγγίζει τη συνάρτηση, κάνοντας ελάχιστο το συνολικό τετραγωνικό φάλμα.

Παράδειγμα 5.6 *Να βρεθεί η παραβολή που προσεγγίζει τη συνάρτηση* $y = \cos x$ *κατά τον καλύτερο τρόπο στο διάστημα* $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$.

Λύση Έστω $P_2(x) = ax^2 + bx + c$ η παραβολή που προσεγγίζει με τον καλύτερο τρόπο την συνάρτησή μας. Για την εύρεση των συντελεστών a, b και c αρκεί να λύσουμε το σύστημα (5.13), το οποίο στην προκειμένη περίπτωση γίνεται

$$E_a(a,b,c) = 0,\ E_b(a,b,c) = 0 \text{ και } E_c(a,b,c) = 0$$

ή αναλυτικότερα

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial a}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}}(f(x) - ax^2 - bx - c)^2 dx = 0 \\ \\ \frac{\partial}{\partial b}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}}(f(x) - ax^2 - bx - c)^2 dx = 0 \\ \\ \frac{\partial}{\partial c}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}}(f(x) - ax^2 - bx - c)^2 dx = 0 \end{cases}$$

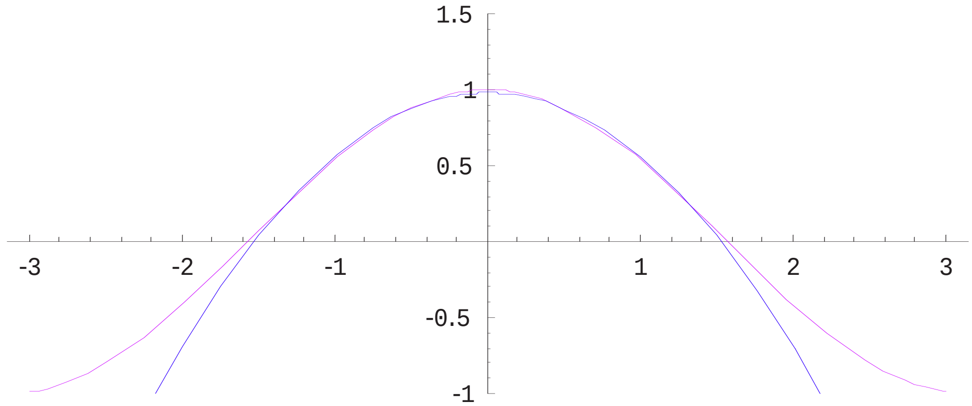
το οποίο με τη σειρά του μας δίνει το σύστημα

$$\begin{cases} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}}\frac{\partial}{\partial a}(f(x) - ax^2 - bx - c)^2 dx = 0 \\ \\ \int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}}\frac{\partial}{\partial b}(f(x) - ax^2 - bx - c)^2 dx = 0 \\ \\ \int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}}\frac{\partial}{\partial c}(f(x) - ax^2 - bx - c)^2 dx = 0 \end{cases}$$

και τελικά μετά από τις αναγκαίες πράξεις

$$\begin{cases} a\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^4 dx + b\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^3 dx + c\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^2 dx = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x dx \\ \\ a\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^3 dx + b\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^2 dx + c\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x dx = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x \cos x dx \\ \\ a\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x^2 dx + b\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} x dx + c\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} dx = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} \cos x dx \end{cases} \tag{5.15}$$

Ο υπολογισμός των επιμέρους ορισμένων ολοκληρωμάτων του συστήματος (5.15)



Σχήμα 5.10: Προσέγγιση της $y = \cos x$ στο $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ με παραβολή

μας δίνει το ακόλουθο σύστημα προς λύση

$$\begin{cases} \frac{\pi^5}{80}a + \frac{\pi^3}{12}c = \frac{\pi^2}{2} - 4 \\ \frac{\pi^3}{12}b = 0 \\ \frac{\pi^3}{12}a + \pi c = 2 \end{cases} \tag{5.16}$$

Η επίλυση του συστήματος (5.16) μας δίνει τους συντελεστές της παραβολής η οποία τελικά είναι η

$$f(x) = \frac{60(\pi^2 - 12)}{\pi^5}x^2 - \frac{3(\pi^2 - 20)}{\pi^3}$$

Το επόμενο πρόγραμμα στο «Mathematica» μας δίνει τα ίδια με τα προηγούμενα αποτελέσματα

```
Clear[a, b, c, x, f, A, A1, A2, A3];
f[x_] = a*x^2 + b*x + c;
A[a_, b_, c_] = Integrate[(Cos[x] - f[x])^2, {x, -Pi/2, Pi/2}];
A1= D[A[a, b, c], a];
A2 = D[A[a, b, c], b];
A3 = D[A[a, b, c], c];
```

```
Solve[{A1 == 0, A2 == 0, A3 == 0}, {a, b, c}]
```

Τέλος στο σχήμα (5.10) φαίνεται η προσέγγιση που πετύχαμε στη συνάρτησή μας με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.

Παρατήρηση 5.6.1 *Ο πίνακας του συστήματος (5.15) και κατ' επέκταση του (5.14) είναι ένας πίνακας με «κακή κατάσταση» και ως εκ τούτου η επίλυση του συστήματος παρουσιάζει δυσκολίες. Για το λόγο αυτό αλλά και για λόγους υπολογιστικούς η προσέγγιση των συναρτήσεων γίνεται με τα πολυώνυμα Legendre. Δε θα αναφερθούμε εδώ στη θεωρία αυτή, γιατί ξεφεύγει από το σκοπό των σημειώσεών μας, θα μπορούσε όμως κάποιος να πάρει μια πρώτη ίδέα από αυτή στα ([3] και [12]). Επίσης στα ίδια βιβλία θα μπορούσε κάποιος να δει για την mini-max θεωρία καθώς και την προσέγγιση με πολυώνυμα Chebyshev.*

Ασκήσεις

Άσκηση 5.1 *Να βρεθεί το πρωτοβάθμιο και το δευτεροβάθμιο πολυώνυμο που προσεγγίζει τα σημεία*

x	1	1.9	2.3	3.2	3.7	4.5	5
f	4	3.4	2.5	2	1.3	0.4	0.1

Να γίνει η γραφική παράσταση αυτών.

Άσκηση 5.2 *Να βρεθεί η συνάρτηση $y = e^{ax+b}$ που προσεγγίζει τα σημεία*

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
f	1.65	1.73	1.82	1.92	2.01	2.12

Να γίνει η γραφική παράσταση αυτής.

Άσκηση 5.3 *Να βρεθεί η συνάρτηση $y = ba^x$ που προσεγγίζει τα σημεία*

x	2	3	5	9	13	22
f	2.83	3.46	4.47	6	7.21	9.38

Να γίνει η γραφική παράσταση αυτής.

Άσκηση 5.4 *Να βρεθεί η συνάρτηση $y = \frac{1}{ax+b}$ που προσεγγίζει τα παρακάτω σημεία, με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.*

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
f	10	2	1.11	0.77	0.59	0.48

Άσκηση 5.5 *Να βρεθεί η συνάρτηση* $y = a\sqrt{x} + b\frac{1}{\sqrt{x}}$, *που προσεγγίζει τα παρακάτω σημεία, με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.*

x	0.2	0.4	0.6	0.8	1
f	2.24	1.26	0.77	0.44	0.2

Άσκηση 5.6 *Να προσεγγίσετε τη συνάρτηση* $y = \sin x$, *με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων στα διαστήματα* $[0, \pi]$ *και* $[\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$, *με ένα πολυώνυμο το πολύ δευτέρου βαθμού. Να κάνετε τις σχετικές γραφικές παραστάσεις και να σχολιάσετε το γεγονός.*

Επίλυση εξισώσεων

6.1 Γενικά

Οι δυσκολίες επίλυσης των εξισώσεων είναι γνωστές από τα Γυμνασιακά χρόνια. Ωστόσο τη δυσκολία μας αυτή σχεδόν όλοι μας τη συνειδητοποιήσαμε στο Λύκειο, όταν ανακαλύψαμε ξαφνικά ότι την επίλυση πολυωνυμικών εξισώσεων $3^{ου}$ και $4^{ου}$ βαθμού μπορούμε μεν να την κάνουμε, χρησιμοποιώντας κάποιους τύπους, είναι όμως πολύπλοκη η εφαρμογή των τύπων αυτών και η επίλυση εξισώσεων βαθμού μεγαλύτερου του $5^{ου}$ είναι αδύνατη με κάποια διαδικασία ή τύπο. Βέβαια, για ειδικές μορφές πολυωνυμικών εξισώσεων και ειδικές μορφές άλλων τύπων εξισώσεων (π.χ. τριγωνομετρικές ή λογαριθμικές) έχουν κατά καιρούς αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι, που ένας μεγάλος αριθμός από αυτές διδάσκεται στο Λύκειο. Το σύνολο όμως των εξισώσεων δε λύνεται με συμβατικούς τρόπους και επομένως και ένας μεγάλος αριθμός προβλημάτων περιμένει λύση μέσα από υπολογιστικές μεθόδους.

Παράδειγμα 6.1 *Ο πληθυσμός p_t μιας ομάδας δίνεται από τον παρακάτω τύπο*

$$p_t = p_0 e^t - q_t \frac{e^t - 1}{t},$$

όπου p_0 είναι ο πληθυσμός της ομάδας την αρχική χρονική στιγμή, q_t ο ρυθμός μεταβολής του πληθυσμού κατά την t χρονική στιγμή. Να βρεθεί η χρονική στιγμή κατά την οποία $p_t = q_t = 1332$ αν $p_0 = 1022$

Το παράδειγμα (6.1) είναι ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα τέτοιας περίπτωσης, όπου απαιτείται λύση, ωστόσο οι μέθοδοι που είναι γνωστές για τη λύση μιας εξίσωσης αποτυγχάνουν να τη λύσουν.

Για την επίλυση μιας εξίσωσης με υπολογιστικές μεθόδους, ορισμένες εκ των οποίων θα αναπτύξουμε στη συνέχεια, συνήθως προϋπόθεση αποτελεί ο εντοπισμός της ρίζας, δηλαδή η εύρεση ενός διαστήματος στο οποίο ανήκει η ρίζα. Κύρια εργαλεία για την εύρεση τέτοιων διαστημάτων αποτελούν η γραφική παράσταση της συνάρτησης, εφόσον κατορθώσουμε να την κάνουμε π.χ. με κάποιο σχεδιαστικό και το Θεώρημα του Bolzano ([2], [9]), το οποίο αναφέρουμε αμέσως.

Θεώρημα 6.1.1 *Έστω η συνάρτηση f η οποία είναι συνεχής στο κλειστό διάστημα $[a, b]$. Αν ισχύει $f(a)f(b) < 0$, τότε η συνάρτηση έχει τουλάχιστον μια ρίζα $\xi \in [a, b]$.*

Παρατήρηση 6.1.1 *Το παραπάνω θεώρημα ισχύει τροποποιημένο και για ανοικτό ή ημιάνοικτο διάστημα, με τη μόνη διαφορά ότι η τιμή της συνάρτησης στα άκρα αντικαθίσταται από τα όρια στα άκρα αυτά.*

6.2 Η Μέθοδος της διχοτόμησης

Η πλέον απλή μέθοδος εύρεσης ρίζας εξίσωσης είναι η μέθοδος της διχοτόμησης. Η μέθοδος αυτή στηρίζεται στο Θεώρημα (6.1.1) που προαναφέραμε, γιαυτό και πολλές φορές αναφέρεται σαν μέθοδος του Bolzano. Θεωρούμε τη συνεχή συνάρτηση $f(x)$ $x \in [a, b] \subset \mathbb{R}$, με $f(a)f(b) < 0$. Από το Θεώρημα (6.1.1) θα υπάρχει μία τουλάχιστον ρίζα $\xi \in (a, b)$. Για την περιγραφή της μεθόδου θα υποθέσουμε επιπλέον ότι η ρίζα αυτή είναι μοναδική στο διάστημα αυτό. Σε αντίθετη περίπτωση χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή για την εφαρμογή της μεθόδου. Εκλέγουμε το σημείο $x_0 = \frac{a+b}{2}$ και ελέγχουμε την τιμή της $f(x_0)$. Δυο περιπτώσεις υπάρχουν· α)$f(x_0) = 0$, στην περίπτωση αυτή το πρόβλημα έχει λυθεί, αφού βρήκαμε την ρίζα ή β)$f(x_0) \neq 0$, στην περίπτωση αυτή θεωρούμε ότι η τιμή x_0 είναι μια προσέγγιση της ρίζας μας. Εάν βρισκόμαστε στη δεύτερη περίπτωση, το σημείο x_0 με ένα από τα άκρα του προηγούμενου διαστήματος ορίζουν ένα καινούργιο διάστημα, στο οποίο βρίσκεται η ρίζα μας. Υποθέτοντας ότι το άκρο αυτό είναι το a και θέτοντας $a_1 = a$ και $b_1 = x_0$, ορίζεται το διάστημα $[a_1, b_1] \subset [a_0, b_0]$, στο οποίο βρίσκεται η ρίζα της εξίσωσής μας. Εκλέγουμε τώρα το σημείο $x_1 = \frac{a_1+b_1}{2}$ και κάνουμε την προηγούμενη διαδικασία ..., οπότε ορίζεται με αυτόν τον τρόπο ένα καινούργιο διάστημα $[a_2, b_2] \subset [a_1, b_1]$ στο οποίο βρίσκεται η ρίζα ξ και ένα καινούργιο $x_2 = \frac{a_2+b_2}{2}$ κ.ο.κ.

Η παραπάνω διαδικασία ορίζει μια ακολουθία x_n, η οποία συγκλίνει στη ρίζα ξ. Πράγματι επειδή ισχύει

$$
\begin{aligned}
|x_n - \xi| &\leq \frac{1}{2}|a_n - b_n| \\
&= \frac{1}{2^2}|a_{n-1} - b_{n-1}| \\
&= \frac{1}{2^3}|a_{n-2} - b_{n-2}| \\
&\vdots \\
&= \frac{1}{2^{n+1}}|a - b|
\end{aligned}
\tag{6.1}
$$

και $\lim \frac{1}{2^n} = 0$, συμπεραίνουμε ότι $\lim x_n = \xi$.

Παράδειγμα 6.2 *Να γίνουν πέντε επαναλήψεις της μεθόδου της διχοτόμησης για την εύρεση της $\sqrt{5}$. Τι ακρίβειας είναι η ρίζα που βρήκατε;*

Λύση Η $\sqrt{5}$ είναι η θετική ρίζα της εξίσωσης $f(x) = x^2 - 5 = 0$. Είναι εύκολο να διαπιστωθεί ότι $f(2.2) = 4.84 - 5 = -0.16 < 0$ ενώ $f(2.5) = 6.25 - 5 = 1.25 > 0$. Επομένως η ρίζα μας βρίσκεται στο διάστημα $[a, b] = [2.2, 2.5]$. Για τη λειτουργία της μεθόδου με χαρτί και μολύβι προτείνουμε τον παρακάτω πίνακα. Στην πρώτη στήλη γράφουμε τα βήματα, στη δεύτερη και τρίτη τις τιμές των a_i και b_i, τέλος στην τέταρτη και πέμπτη τις τιμές των x_i και $f(x_i)$ αντίστοιχα.

βήμα	$a_i(-)$	$b_i(+)$	$x_i = \frac{a_i+b_i}{2}$	$f(x_i)$
0	$2,2$	$2,5$	$2,35$	$0,5225$
1	$2,2$	$2,35$	$2,275$	$0,175625$
2	$2,2$	$2,275$	$2,2375$	$0,00640625$
3	$2,2$	$2,2375$	$2,21875$	$-0,077148438$
4	$2,21875$	$2,2375$	$2,228125$	$-0,035458984$
5	$2,228125$	$2,2375$	$2,2328125$	$-0,01454834$

Θεωρώντας σαν προσεγγιστική τιμή της ρίζας μας την τελευταία τιμή ($\xi^* = x_5$), θα έχουμε $|\xi^* - \xi| < 0.5 \cdot |a_5 - b_5| = \cdots = 0.0046 < 0.5 \cdot 10^{-2}$, το οποίο σημαίνει ότι προσεγγίζουμε τη ρίζα μας σε δύο δεκαδικά ψηφία.

Η μέθοδος της διχοτόμησης είναι η μοναδική μέθοδος εύρεσης ρίζας, στην οποία μπορούμε να προϋπολογίσουμε τον αριθμό των επαναλήψεων για την επιθυμητή προσέγγιση. Πράγματι, αν υποθέσουμε ότι επιθυμούμε να προσεγγίσουμε τη ρίζα κάποιας εξίσωσης με ακρίβεια ε, από τη σχέση (6.1) θα έχουμε

$$\begin{aligned}
|\xi^* - \xi| = |x_n - \xi| &\leq \frac{1}{2^{n+1}}|a-b|, \text{ αρκεί} \\
\frac{1}{2^{n+1}}|a-b| &\leq \varepsilon \\
\frac{|a-b|}{\varepsilon} &\leq 2^{n+1} \\
\ln(\frac{|a-b|}{\varepsilon}) &\leq (n+1)\ln 2 \\
(n+1) &\geq (\ln 2)^{-1}\ln(\frac{|a-b|}{\varepsilon}) \\
n &\geq (\ln 2)^{-1}\ln(\frac{|a-b|}{\varepsilon}) - 1
\end{aligned} \tag{6.2}$$

Παράδειγμα 6.3 *Να υπολογίσετε τις επαναλήψεις n που χρειάζεται η μέθοδος της διχοτόμησης για την εύρεση της $\sqrt[3]{5}$ με ακρίβεια 5 δεκαδικά ψηφία. Στη συνέχεια να χρησιμοποιήσετε το n για να βρείτε τη ρίζα χρησιμοποιώντας οποιοδήποτε μαθηματικό πακέτο.*

Λύση Η $\sqrt[3]{5}$ είναι η πραγματική ρίζα της εξίσωσης $f(x) = x^3 - 5 = 0$. Είναι εύκολο να διαπιστωθεί ότι $f(1) = 1 - 5 = -4 < 0$, ενώ $f(2) = 8 - 5 = 3 > 0$. Επομένως η η ρίζα μας βρίσκεται στο διάστημα $[a, b] = [1, 2]$. Από την (6.2) με $a = 1, b = 2$ και $\varepsilon = 0.5 \cdot 10^{-5}$ έχουμε ότι

$$n \geq (\ln 2)^{-1}\ln(\frac{|a-b|}{\varepsilon}) - 1 \approx 16.6096$$

Επομένως ο ακριβής αριθμός επαναλήψεων είναι $n = 17$. Δίνουμε στη συνέχεια σε Matlab κώδικα τον αλγόριθμο για την εύρεση της ρίζας

```
a = 1; b = 2; n = 17;
for i = 1:n
  x = (a+b)/2;
  if x^3-5 < 0
     a = x;
  else
```

```
      b = x;
   end
end
```

Το παραπάνω πρόγραμμα αποδίδει

```
a =
   1.7099609375
b =
   1.70997619628906
(a+b)/2
   1.70996856689453
```

Εύκολα κάποιος μπορεί να επαληθεύσει την ορθότητα της θεωρίας.

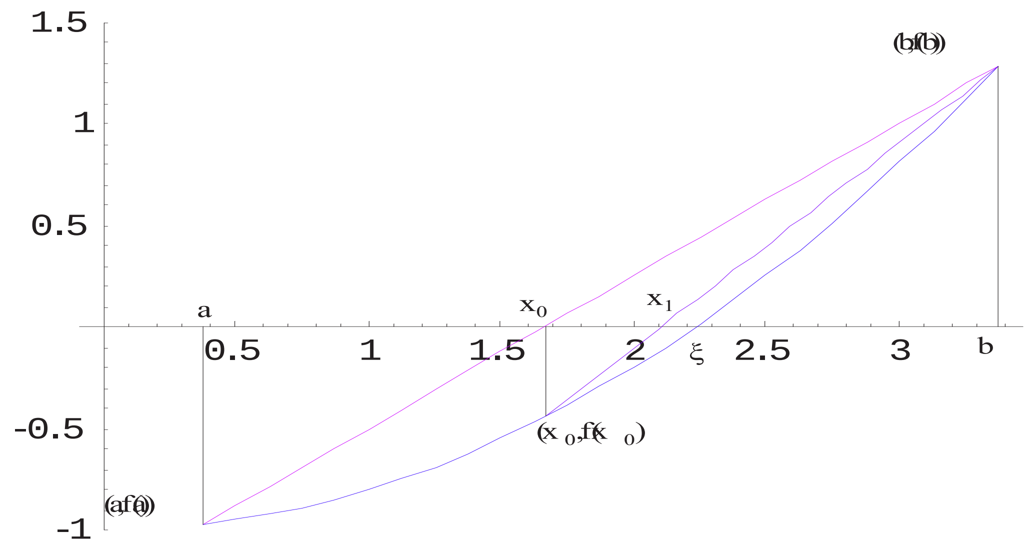
6.3 Η Μέθοδος της εσφαλμένης θέσης

Στην προηγούμενη παράγραφο η προσέγγιση της ρίζας της εξίσωσης έγινε με το μέσο του διαστήματος $[a, b]$ στο οποίο βρισκόταν η ρίζα. Μια διαφορετική ιδέα θα ήταν να προσεγγίσουμε τη συνάρτηση με ευθεία και στη συνέχεια τη ρίζα (σημείο τομής της γραφικής παράστασης της συνάρτησης με τον οριζόντιο άξονα) με τη ρίζα της ευθείας (σημείο τομής της γραφικής παράστασης της ευθείας με τον οριζόντιο άξονα). Η Γραφική παράσταση της μεθόδου φαίνεται στο σχήμα (6.11). Η μέθοδος της εσφαλμένης θέσης αναφέρεται στη βιβλιογραφία και ως μέθοδος Regula - falsi. Το σημείο x_0 μπορούμε να το βρούμε ως εξής: Από τον τύπο (2.8) βρίσκουμε το πολυώνυμο πρώτου βαθμού, που διέρχεται από τα σημεία $(a, f(a))$ και $(b, f(b))$, ήτοι το

$$p_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b). \tag{6.3}$$

Αφού το x_0 είναι ρίζα του $p_1(x)$, θα προκύπτει ως η λύση της εξίσωσης $p_1(x) = 0$ δηλαδή

$$x_0 = \frac{bf(a) - af(b)}{f(a) - f(b)}$$



Σχήμα 6.11: Γεωμετρική παράσταση της Regula Falsi

Από το σχήμα (6.11) γίνεται φανερό ότι το σημείο x_0, η προσέγγιση της ρίζας μας, ανήκει στο διάστημα $[a, b]$ και με ένα από τα άκρα (όπως και στη μέθοδο της διχοτόμησης) ορίζει ένα καινούργιο διάστημα το $[a_1, b_1]$, στο οποίο βρίσκεται η ρίζα, οπότε βρίσκουμε, όπως και προηγουμένως, ένα καινούργιο x_1 (μια καινούργια προσέγγιση) κ.λ.π.. Δημιουργούμε με αυτόν τον τρόπο την επόμενη ακολουθία

$$x_n = \frac{b_n f(a_n) - a_n f(b_n)}{f(a_n) - f(b_n)}, \tag{6.4}$$

η οποία συγκλίνει στη ρίζα ξ. Η απόδειξη της σύγκλισης της ακολουθίας αυτής ξεφεύγει από τους σκοπούς των σημειώσεων αυτών. Θα αποδείξουμε όμως το επόμενο θεώρημα.

Θεώρημα 6.3.1 *Θεωρούμε ότι η συνεχής συνάρτηση f έχει μια μοναδική ρίζα στο διάστημα $[a, b]$. Στην επαναληπτική διαδικασία (6.4), που περιγράφτηκε παραπάνω, σε κάθε επανάληψη, το σημείο x_n που βρίσκουμε ανήκει στο διάστημα $[a_n, b_n]$.*

Απόδειξη: Αρκεί να δειχτεί ότι $x_n - a_n > 0$ και $b_n - x_n > 0$. Θα αποδείξουμε το πρώτο και θα αφήσουμε την απόδειξη του δεύτερου ως άσκηση, αφού είναι ακριβώς ίδια. Από την (6.4) έχουμε

$$x_n - a_n = \frac{b_n f(a_n) - a_n f(b_n)}{f(a_n) - f(b_n)} - a_n = \frac{b_n f(a_n) - a_n f(b_n) - a_n f(a_n) + a_n f(b_n)}{f(a_n) - f(b_n)}$$

$$= \frac{(b_n - a_n) f(a_n)}{f(a_n) - f(b_n)}$$

Από τον τρόπο που ορίστηκε το διάστημα $[a_n, b_n]$, γίνεται φανερό ότι $f(a_n)f(b_n) < 0$. Έτσι το πρόσημο της διαφοράς $f(a_n) - f(b_n)$ έχει το ίδιο πρόσημο με το $f(a_n)$ (γιατί;), δηλαδή $sign(f(a_n) - f(b_n)) = sign(a_n)$. Οπότε $x_n - a_n > 0$. □

Παρόλο που η μέθοδος της τέμνουσας μοιάζει με τη μέθοδο της διχοτόμησης, καμιά σχέση δεν έχουν μεταξύ τους. Στη μέθοδο της διχοτόμησης η ρίζα προκύπτει ως το σημείο που καταλήγει ένα διάστημα που κλείνει συνεχώς. Αντίθετα στη μέθοδο της τέμνουσας η ρίζα προσδιορίζεται ως ο αριθμός, στον οποίο συγκλίνει μια ακολουθία σημείων. Στο σχήμα (6.11) αυτό γίνεται φανερό. Για παράδειγμα, στο σχήμα (6.11) φαίνεται ότι το άκρο b_n παραμένει σταθερό και ίσο με b, βέβαια αυτό οφείλεται στο επόμενο Θεώρημα.

Θεώρημα 6.3.2 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x)$, η οποία είναι δυο φορές παραγωγίσιμη και έχει μια μοναδική ρίζα στο διάστημα $[a, b]$. Αν η δεύτερη παράγωγος της $f(x)$ διατηρεί πρόσημο στο διάστημα $[a, b]$ και $f(a)f''(a) > 0$, τότε η ακολουθία (6.4) παίρνει τη μορφή*

$$x_n = \frac{x_{n-1} f(a) - a f(x_{n-1})}{f(a) - f(x_{n-1})}, \text{ με } n = 1, 2, \ldots \text{ και } \quad x_0 = b \tag{6.5}$$

διαφορετικά ($f(a)f''(a) < 0$)

$$x_n = \frac{x_{n-1} f(b) - b f(x_{n-1})}{f(b) - f(x_{n-1})}, \text{ με } n = 1, 2, \ldots \text{ και } \quad x_0 = a \tag{6.6}$$

Απόδειξη:

Θεωρούμε αρχικά ότι $f''(x) > 0$ $\forall x \in [a, b] = [a_0, b_0]$ και $f(a)f''(a) > 0$, οπότε έχουμε άμεσα ότι $f(a) > 0$. Αν υποθέσουμε ότι βρισκόμαστε στο βήμα $k = 0, 1, 2, \ldots$, τότε από την (2.2.2) ισχύει

$$f(x_k) - P_1(x_k) = \frac{f''(\eta)}{2!}(x_k - a)(x_k - x_{k-1})$$

Αφού $P_1(x_k) = 0$, $f''(\eta) > 0$, $x_k - a > 0$ και $x_k - x_{k-1} < 0$ προκύπτει ότι $f(x_k) < 0$, επομένως η ρίζα μας βρίσκεται στο $[a, x_k]$ και η διαδικασία μας συνεχίζεται. Παρόμοια συμπεράσματα μπορούμε να πάρουμε για την περίπτωση $f''(x) < 0\ \forall x \in [a, b] = [a_0, b_0]$. Η σχέση (6.6) αποδεικνύεται με τον ίδιο τρόπο. $\square$

Στην πράξη ο αλγόριθμος σταματά, όταν δυο διαδοχικές επαναλήψεις συμπίπτουν σε ένα προκαθορισμένο πλήθος k σημαντικών ή δεκαδικών ψηφίων και η τελευταία επανάληψη λαμβάνεται ως η προσέγγιση της ρίζας μας. Το πλήθος k θα είναι η «ακρίβεια» εύρεσης της ρίζας μας, χωρίς όμως αυτό να σημαίνει ότι και στην πραγματικότητα η τελευταία επανάληψη συμπίπτει με την πραγματική τιμή της ρίζας σε k σημαντικά ή δεκαδικά ψηφία. Άλλες φορές πάλι ως κριτήριο σταματήματος χρησιμοποιούμε την τιμή της συνάρτησης, απαιτώντας αυτή να είναι αρκούντως κοντά στο μηδεν (το υπόλοιπο να είναι πολύ μικρό).

Παράδειγμα 6.4 *Να γίνουν πέντε επαναλήψεις της μεθόδου της εσφαλμένης θέσης για την εύρεση της $\sqrt{5}$. Να συγκρίνετε το υπόλοιπο της τιμής που βρήκατε ($f(x^*)$) με το υπόλοιπο της τιμής που βρήκατε στο παράδειγμα (6.2).*

Λύση Εργαζόμενοι στο διάστημα $[2.2, 2.5]$ του παραδείγματος (6.2), μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι $f''(x) > 0$ με $x \in [2.2, 2.5]$ και $f''(2.2)f(2.2) < 0$. Συνεπώς θα χρησιμοποιήσουμε τον τύπο (6.6). Έτσι έχουμε, αν πάρουμε ως x_0 το άλλο άκρο, $x_1 = 2.23404255319149$, $x_2 = 2.23595505617978$, $x_3 = 2.23606168446026$, $x_4 = 2.23606762680025$ και $x_5 = 2.23606795795597$.
Το υπόλοιπο είναι $f(x_5) = 0.000000000000000888$. Αντίθετα στο παράδειγμα (6.2) το υπόλοιπο είναι $f(x^*) = -0.014548$. Γίνεται φανερό ότι η μέθοδος της εσφαλμένης θέσης είναι τρομερά πιο γρήγορη σε σχέση με τη μέθοδο της διχοτόμησης, τουλάχιστον σε ορισμένες περιπτώσεις.

6.4 Η γενική επαναληπτική Μέθοδος

Πριν μιλήσουμε για τη μέθοδο, θα δώσουμε μερικές εισαγωγικές έννοιες και την απαραίτητη θεωρία από τα Μαθηματικά για την κατανόησή της.

Ορισμός 6.4.1 *Έστω η συνάρτηση $g(x)$ με πεδίο ορισμού το σύνολο A. Το σημείο $\widetilde{x} \in A$ λέγεται σταθερό σημείο, αν και μόνον αν $g(\widetilde{x}) = \widetilde{x}$.*

Πρόταση 6.4.2 *Από τις συνεχείς συναρτήσεις, εκείνες για τις οποίες το σύνολο τιμών είναι υποσύνολο του πεδίου ορισμού τους, δηλαδή ισχύει $g(A) \subseteq A$, έχουν ένα τουλάχιστον σταθερό σημείο.*

Απόδειξη: Πράγματι, εάν $g(a) = a$ ή $g(b) = b$ και η πρόταση ισχύει. Διαφορετικά $a < g(a)$ και $g(b) < b$, οπότε ορίζουμε τη συνάρτηση $h(x) = g(x) - x$ για την οποία ισχύει $h(a)h(b) < 0$ και η πρόταση ισχύει λόγω του θεωρήματος (6.1.1). □

Ορισμός 6.4.3 *Έστω η συνάρτηση $g(x)$ με πεδίο ορισμού το σύνολο $A \subset \Re$. Θα λέμε ότι η συνάρτηση $g(x)$ ικανοποιεί στο πεδίο ορισμού της μια συνθήκη Lipschitz, αν και μόνον αν*

$$\forall x, y \in A, \ \exists \lambda \in \Re, \text{ τέτοιο ώστε } |g(x) - g(y)| \leq \lambda |x - y| \tag{6.7}$$

Αν επιπλέον ισχύει $\lambda < 1$, θα λέμε ότι η συνάρτησή μας είναι μια συστολή.

Παρατήρηση 6.4.1 *Αποδεικνύεται ([1]) ότι παραγωγίσιμες συναρτήσεις με συνεχή παράγωγο σε ένα κλειστό διάστημα $[a, b]$, πληρούν μια συνθήκη Lipschitz και επιπλέον το μικρότερο λ που πληρεί τη συνθήκη είναι το*

$$\lambda = \max_{x \in [a,b]} |g'(x)|$$

Ο ορισμός (6.4.1) υποδεικνύει από μόνος του τη δημιουργία μιας ακολουθίας της

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \text{ και } x_0 \text{ κατάλληλο,} \tag{6.8}$$

η οποία αν συγκλίνει, θα συγκλίνει στο σταθερό σημείο της συνάρτησης $g(x)$. Δηλαδή $x_n \to \xi \ \Rightarrow \ \xi = g(\xi)$.
Έστω λοιπόν τώρα η εξίσωση $f(x) = 0$ με μια μοναδική ρίζα ξ στο διάστημα $[a, b]$. Μια ιδέα για την εύρεση της ρίζας μας ξ είναι να τροποποιήσουμε την εξίσωσή μας (να την αναδιατάξουμε) στη μορφή $x = g(x)$ και να προτείνουμε τον αλγόριθμο (6.8) για την εύρεσή της. Φυσικά η ρίζα θα βρίσκεται, αν ο αλγόριθμος συγκλίνει σε ένα μοναδικό σταθερό σημείο του διαστήματος $[a, b]$. Κάθε τιμή του αλγορίθμου θα είναι και μια προσέγγιση για τη ρίζα μας. Έτσι κάθε φορά θα ισχύει

$$\varepsilon_n = |x_n - \xi| = |g(x_{n-1}) - g(\xi)|, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{6.9}$$

Αν η συνάρτηση $g(x)$ πληρεί μια συνθήκη Lipschitz στο διάστημα $[a, b]$ και εκλέξουμε το x_0 έτσι ώστε όλες οι επαναλήψεις να πέφτουν μέσα στο διάστημα $[a, b]$, από την (6.9) θα έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \varepsilon_n = |x_n - \xi| &\leq \lambda |x_{n-1} - \xi| = \lambda \varepsilon_{n-1} \\ \varepsilon_{n-1} &\leq \lambda \varepsilon_{n-2} \\ &\vdots \\ \varepsilon_1 &\leq \lambda \varepsilon_0 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη τις προηγούμενες σχέσεις προκύπτει ότι

$$\varepsilon_n \leq \lambda^n \varepsilon_0$$

Αν επιπλέον ισχύει $\lambda < 1$, το $\varepsilon_n \to 0$ οπότε $x_n \to \xi$. Πράγματι αν υποθέσουμε ότι συγκλίνει σε κάποιο άλλο σημείο η, θα ισχύει

$$|\xi - \eta| = |g(\xi) - g(\eta)| \leq \lambda |\xi - \eta| < |\xi - \eta|$$

το οποίο είναι άτοπο. Έτσι αποδείχτηκε το επόμενο

Θεώρημα 6.4.4 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $g(x)$, $x \in [a, b]$, η οποία είναι μια συστολή στο $[a, b]$ και προέρχεται από την αναδιάταξη της $f(x) = 0$ σε $x = g(x)$. Ο αλγόριθμος (6.8) για κάθε «κατάλληλο» x_0 στο μοναδικό σταθερό σημείο του διαστήματος, που είναι η ρίζα της εξίσωσης $f(x) = 0$.*

Παρατήρηση 6.4.2 *Ως «κατάλληλο» x_0 μπορούμε να εκλέξουμε οποιοδήποτε σημείο, που ανήκει στο μικρότερο από τα διαστήματα $[a, \xi] \cup [\xi, b]$. Πράγματι, από τις σχέσεις (6.10), για κάθε επανάληψη ισχύει $x_{i+1} \in [x_i, \xi]$ ή $x_{i+1} \in [\xi, x_i]$ ανάλογα με την θέση του x_i, οπότε τελικά $x_{i+1} \in [a, b]$.*

Παρατήρηση 6.4.3 *Το μικρότερο από τα διαστήματα της προηγούμενης παρατήρησης μπορεί να βρεθεί από το κατά πόσο η ρίζα ξ βρίσκεται δεξιά ή αριστερά από το κέντρο $\frac{a+b}{2}$ του διαστήματος $[a, b]$. Πρακτικά λοιπόν ως x_0 εκλέγουμε το άκρο του διαστήματος που βρίσκεται από τη μεριά της ρίζας.*

Η αναδιάταξη της $f(x) = 0$ σε $x = g(x)$ δεν είναι μονοσήμαντη. Πολλές σχέσεις της μορφής $x = g(x)$ μπορούν να προκύψουν. Για παράδειγμα για την εύρεση της θετικής τετραγωνικής ρίζας της $(f(x) =)x^2 - 2 = 0$ μπορούν να προταθούν α) $x = x^2 + x - 2(= g_1(x))$, β) $x = -0.5x^2 + x + 1(= g_2(x))$ και ένα μεγάλο πλήθος άλλων ισοτήτων. Κατάλληλες βέβαια θα είναι εκείνες που είναι συστολές στο διάστημα προσδιορισμού της ρίζας. Εύκολα κάποιος διαπιστώνει ότι $\xi \in [1, 2]$. Εξετάζοντας την g_1 στο παραπάνω διάστημα παρατηρούμε ότι

$$|g_1(x) - g_1(y)| = \cdots = |x + y + 1||x - y| \leq 5|x - y|, \ \forall x, y \in [1, 2]$$

επομένως δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το Θεώρημα (6.4.4). Εξετάζοντας τώρα την g_2 στο παραπάνω διάστημα παρατηρούμε ότι

$$|g_2(x) - g_2(y)| = \cdots = |1 - 0.5(x + y)||x - y| \leq 1|x - y|, \ \forall x, y \in [1, 2]$$

επομένως πάλι δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το Θεώρημα (6.4.4). Αν όμως χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο της διχοτόμησης, βρίσκουμε ότι επίσης $\xi \in [1, 1.5]$. Εξετάζοντας ομοίως τις δυο συναρτήσεις βρίσκουμε ότι η g_1 δεν είναι συστολή στο καινούργιο διάστημα, όμως για την g_2 ισχύει

$$|g_2(x) - g_2(y)| = \cdots = |1 - 0.5(x + y)||x - y| \leq 0.5|x - y|, \ \forall x, y \in [1, 1.5]$$

οπότε η g_2 είναι συστολή στο $[1, 1.5]$. Μπορούμε λοιπόν να χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο

$$x_n = -0.5x_{n-1}^2 + x_{n-1} + 1, \ n = 1, 2, \ldots \text{ με «κατάλληλο» } x_0$$

Ως «κατάλληλο» x_0 εκλέγουμε το δεξί άκρο του διαστήματος, δηλ. $x_0 = 1.5$, αφού η ρίζα βρίσκεται δεξιά του μέσου $\frac{1+1.5}{2} = 1.25$. Στη συνέχεια δίνουμε τις πέντε πρώτες επαναλήψεις του αλγόριθμου: $x_1 = 1.375$, $x_2 = 1.4297$, $x_3 = 1.4077$, $x_4 = 1.4169$, $x_5 = 1.4131$. Η εξέταση και η εύρεση του λ σε μια συνθήκη Lipschitz δεν είναι πάντα εύκολη υπόθεση, γιαυτό χρησιμοποιούμε την παρατήρηση (6.4.1). Έτσι

Θεώρημα 6.4.5 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $g(x)$, $x \in [a, b]$, η οποία έχει συνεχή παράγωγο στο $[a, b]$ και προέρχεται από την αναδιάταξη της $f(x) = 0$, σε $x = g(x)$. Αν*

$$\max_{x \in [a,b]} |g'(x)| = \lambda < 1,$$

ο αλγόριθμος (6.8) συγκλίνει, για κάθε «κατάλληλο» x_0, στο μοναδικό σταθερό σημείο του διαστήματος, που είναι η ρίζα της εξίσωσης $f(x) = 0$.

Παράδειγμα 6.5 *Να βρεθούν οι θετικές ρίζες της εξίσωσης $(f(x) =)e^x - 2\cos x = 0$, με ακρίβεια πέντε δεκαδικών ψηφίων.*

Λύση Αφού $f'(x) = e^x + 2\sin x > 0 \quad x \in \mathbb{R}^+$, η εξίσωσή μας θα έχει το πολύ μία ρίζα. Επίσης η εξίσωση θα έχει τουλάχιστον μία ρίζα στο $\mathbb{R}^+$, αφού $f(0) \cdot \lim_{x\to+\infty} f(x) < 0$. Έτσι η εξίσωση έχει ακριβώς μία ρίζα. Παρατηρούμε ότι η ρίζα αυτή βρίσκεται στο διάστημα $[0,1]$ αφού $f(0) = -1$ και $f(1) = e - 2\cos 1 > 0$. Για την εύρεση αυτής, μια αναδιάταξη της $f(x) = 0$ είναι η $x = \ln(2\cos x)$, προφανώς $g(x) = \ln(2\cos x)$ και $|g'(x)| = \tan x$, η οποία είναι αύξουσα στο $[0, \frac{\pi}{2}) \supseteqq [0,1]$. Παρατηρούμε ότι στο διάστημα $[0,1]$, ισχύει $\max_{x\in[0,1]} |g'(x)| > \tan\frac{\pi}{4} = 1$. Διχοτομούμε το παραπάνω διάστημα και παρατηρούμε ότι στο διάστημα $[0.5, 1]$, στο οποίο βρίσκεται η ρίζα, επίσης ισχύει $\max_{x\in[0.5,1]} |g'(x)| > 1$. Διχοτομούμε εκ νέου το διάστημά μας, οπότε στο διάστημα $[0.5, 0.75]$, στο οποίο βρίσκεται η ρίζα, ισχύει $\max_{x\in[0.5,0.75]} |g'(x)| = 0.9316 < 1$. Έτσι για την εύρεση της ρίζας χρησιμοποιούμε τον αλγόριθμο

$$x_n = \ln(2\cos x_{n-1}), \quad n = 1, 2, \ldots \text{ και } x_0 = 0.75$$

αφού η ρίζα βρίσκεται δεξιά του 0.625. Το επόμενο πρόγραμμα σε κώδικα matlab μας βρίσκει τη ρίζα με την ακρίβεια που θέλουμε

```
xnew=0.75;
xold=0;
i=0;
while (abs(xold-xnew)>0.000005)
  xold=xnew;
  xnew=log(2*cos(xnew));
  i=i+1;
end
```

Μετά από 23 επαναλήψεις βρίσκουμε $xnew = 0.5398$.

6.5 Η Μέθοδος Newton-Raphson

Η γενική επαναληπτική δεν προτείνει μια συγκεκριμένη μέθοδο, αλλά ένα σύνολο μεθόδων για την εύρεση ρίζας. Το μεγάλο πρόβλημα σε αυτή την περίπτωση είναι ότι ο λύτης πρέπει από μόνος του να βρει ποια από το σύνολο των προτεινόμενων είναι κατάλληλη για χρήση. Οι Newton-Raphson είχαν μια απλή αλλά καταπληκτική ιδέα για την εύρεση μιας γενικής μεθόδου εύρεσης αλγορίθμου, ο οποίος συγκλίνει πάντοτε στη ρίζα, αρκεί να προσδιοριστεί το «κατάλληλο» x_0 και μάλιστα εξαιρετικά γρήγορα. Έτσι, αν υποθέσουμε ότι έχουμε την εξίσωση $f(x) = 0$ στο $[a, b]$ με ρίζα $\xi \in [a, b]$ και $f'(x) \neq 0$, μπορούμε να αναδιατάξουμε την ισότητα ως εξης: Διαιρούμε και τα δυο μέλη με $f'(x)$, πολλαπλασιάζουμε με (-1) και προσθέτουμε και στα δυο μέλη το x, οπότε προκύπτει

$$x = x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \quad x \in [a, b], \tag{6.11}$$

η οποία μας δίνει τον επόμενο αλγόριθμο

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \text{ και «κατάλληλο» } x_0 \tag{6.12}$$

Το δεύτερο μέλος της (6.11) είναι η $g(x)$ της γενικής επαναληπτικής μεθόδου. Αν υποθέσουμε ότι η δεύτερη παράγωγος της $f(x)$ υπάρχει και είναι συνεχής, έχουμε τη συνεχή συνάρτηση

$$g'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} \tag{6.13}$$

Για τη ρίζα ξ η παράγωγος γίνεται $g'(\xi) = 0$, αφού $f(\xi) = 0$. Λόγω της συνέχειας της g' σε μια περιοχή του ξ θα ισχύει $|g'(x)| < 1$, που σημαίνει ότι η μέθοδος συγκλίνει πάντα για «κατάλληλο» x_0. Η εκλογή του «κατάλληλου» x_0 γίνεται όπως και στην προηγούμενη παράγραφο.

Όμως η σύγκλιση της μεθόδου δεν είναι το μόνο της πλεονέκτημα. Ένα άλλο πλεονέκτημά της είναι η ταχύτητα σύγκλισης αυτής. Η τάξη σύγκλισης μιας μεθόδου προσδιορίζεται από τη σχέση που συνδέει τα σφάλματα μεταξύ δυο επαναλήψεων και μας δείχνει πόσο γρήγορα ή αργά συγκλίνει μια μέθοδος. Τα παραπάνω περιέχονται στον επόμενο ορισμό.

Ορισμός 6.5.1 *Έστω x_n μια ακολουθία, η οποία συγκλίνει σε κάποιον αριθμό ξ. Λέμε ότι η σύγκλιση είναι γραμμική αν και μόνον αν*

$$\exists\ 0 < c < 1 \text{ και } n_0 \in \mathbb{N} : |x_{n+1} - \xi| < c|x_n - \xi| \quad \forall n \in \mathbb{N} \text{ με } n > n_0.$$

Λέμε ότι η σύγκλιση είναι τάξης $k > 1$ αν και μόνον αν

$$\exists\ c \in \mathbb{R}^+ : \forall n \in \mathbb{N} \text{ ισχύει } |x_{n+1} - \xi| < c|x_n - \xi|^k.$$

Όταν $k = 2$, η μέθοδος λέγεται τετραγωνικής σύγκλισης ενώ για $k = 3$ η μέθοδος λέγεται κυβικής σύγκλισης. Όσο μεγαλύτερη είναι η τάξη σύγκλισης, τόσο πιο γρήγορη είναι η μέθοδος. Η Μέθοδος Newton-Raphson είναι τουλάχιστον τετραγωνικής σύγκλισης (αν υποθέσουμε ότι είναι φραγμένη η f'' στο $[a, b]$), σε αντίθεση με τη μέθοδο της διχοτόμησης που είναι γραμμική. Αυτό μπορούμε να το δούμε ως εξής:

$$0 = f(\xi) = f(x_n - \varepsilon_n) = f(x_n) - \varepsilon_n f'(x_n) + \frac{\varepsilon_n^2}{2!} f''(\eta),$$

όπου το η είναι μεταξύ του x_n και του ξ. Επίσης έχουμε

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad \Leftrightarrow \quad f(x_n) = f'(x_n)(x_{n+1} - x_n),$$

οπότε

$$(x_{n+1} - x_n + \varepsilon_n) f'(x_n) = \frac{\varepsilon_n^2}{2!} f''(\eta)$$

ή ισοδύναμα

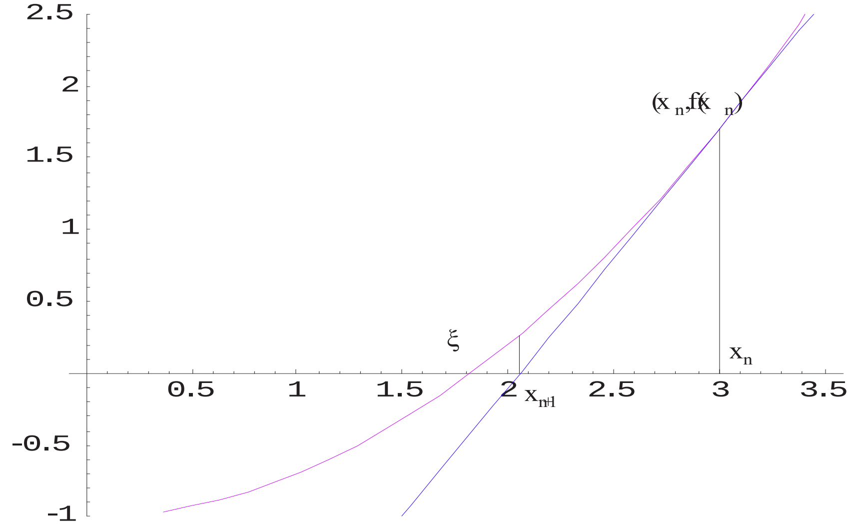
$$\varepsilon_{n+1} = \frac{f''(\eta)}{2 f'(x_n)} \varepsilon_n^2 \tag{6.14}$$

Αφού λοιπόν η f'' είναι φραγμένη στο $[a, b]$), εύκολα μπορούμε να δούμε ότι πληρείται ο ορισμός (6.5.1) με $k = 2$.
Η σχέση (6.14) μας δίνει και έναν διαφορετικό τρόπο για την εκλογή του «κατάλληλου» x_0. Έστω M ένα απόλυτο άνω φράγμα για την f'' και Λ ένα απόλυτο κάτω φράγμα για την f', τότε έχουμε ότι

$$|\varepsilon_{n+1}| = \frac{|f''(\eta)|}{2|f'(x_n)|} \varepsilon_n^2 < \frac{M}{2\Lambda} \varepsilon_n^2 = \lambda \varepsilon_n^2,$$

όπου $\lambda = \frac{M}{2\Lambda}$. Για την εκλογή του «κατάλληλου» x_0 ακολουθούμε τη διαδικασία που ακολουθήσαμε στην προηγούμενη παράγραφο, προσπαθώντας να πετύχουμε $\lambda < 1$. Το πλεονέκτημα είναι ότι πολλές φορές οι πράξεις που υπεισέρχονται είναι λιγότερες από εκείνες της γενικής επαναληπτικής.

Η Μέθοδος Newton-Raphson έχει μεγάλη ομοιότητα με τη μέθοδο της εσφαλμένης θέσης. Σε εκείνη την περίπτωση προσεγγίζουμε την καμπύλη με την ευθεία που περνούσε από δύο σημεία και το καινούργιο σημείο προσέγγισης ήταν το σημείο τομής αυτής με τον οριζόντιο άξονα, ενώ τώρα προσεγγίζουμε



Σχήμα 6.12: Γεωμετρική παράσταση της Newton Raphson

τη συνάρτηση με την εφαπτομένη της καμπύλης στο σημείο $(x_n, f(x_n))$ και το καινούργιο σημείο προσέγγισης είναι το σημείο τομής της, πάλι με τον οριζόντιο άξονα. Πράγματι η εξίσωση της εφαπτομένης στο σημείο $(x_n, f(x_n))$ είναι

$$y = f'(x_n)(x - x_n) + f(x_n)$$

το σημείο τομής με τον οριζόντιο άξονα έχει $y = 0$, οπότε λύνοντας την προηγούμενη ως προς x βρίσκουμε τον τύπο (6.12). Η γεωμετρική ερμηνεία φαίνεται στο σχήμα (6.12). Στη συνέχεια δίνουμε το αντίστοιχο Θεώρημα του (6.3.2).

Θεώρημα 6.5.2 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x)$, η οποία είναι δυο φορές παραγωγίσιμη και επιπλέον οι παράγωγοι διατηρούν το πρόσημό τους στο διάστημα $[a, b]$, στο οποίο βρίσκεται η ρίζα ξ. Αν $f'(x)f''(x) > 0$, τότε ο αλγόριθμος Newton Raphson συγκλίνει, για x_0 τέτοιο ώστε $f(x_0)f''(x) > 0$. Αν $f'(x)f''(x) < 0$, τότε ο αλγόριθμος Newton Raphson συγκλίνει, για x_0 τέτοιο ώστε $f(x_0)f''(x) < 0$.*

Απόδειξη: Η διατήρηση του προσήμου της $f'(x)$ συνεπάγεται τη μοναδικότητα της ρίζας ξ. Υποθέτουμε αρχικά ότι $f'(x) > 0$. Τότε επίσης ισχύει $f''(x) > 0$. Άμεσα συμπεραίνουμε ότι $x_0 > \xi$ και $f(x_0) > 0$. Από την υπόθεση και την (6.14) προκύπτει ότι $x_1 - \xi = \varepsilon_1 > 0$, δηλαδή $x_1 > \xi$. Επίσης από την υπόθεση

και την (6.12) προκύπτει ότι $x_1 - x_0 = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} < 0$, δηλαδή $x_1 < x_0$. Δηλαδή $x_1 \in (\xi, x_0)$, οπότε $\varepsilon_1 = \lambda\varepsilon_0$, με $|\lambda| < 1$. Επαγωγικά μπορούμε παρόμοια να δείξουμε ότι $\varepsilon_{n+1} = \lambda\varepsilon_n$, με $|\lambda| < 1$ και τελικά την αλήθεια του Θεωρήματος για την περίπτωση αυτή. Οι άλλες περιπτώσεις αποδεικνύονται με την ίδια διαδικασία.
$\square$

Παράδειγμα 6.6 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x) = -x^3 + 1.5x^2 + 0.5$. Να αποδείξετε ότι η εξίσωση $f(x) = 0$ έχει μοναδική ρίζα και να προσδιορίσετε ένα κατάλληλο διάστημα γι΄ αυτή. Να χρησιμοποιήσετε τον αλγόριθμο Newton Raphson για να βρείτε τη ρίζα της εξίσωσης με προσέγγιση έξι δεκαδικών ψηφίων.*

Λύση Παρατηρούμε ότι $f(1.1) = 0.984$, ενώ $f(2) = -1.5$, έτσι η ρίζα βρίσκεται στο $[1.1, 2]$. Επίσης η $f'(x) = -3x^2 + 3x < 0$, $\forall x \in [1.1, 2]$ και $f''(x) = -6x + 3 < 0$, $\forall x \in [1.1, 2]$. Έπομένως πληρούνται οι προϋποθέσεις του Θεωρήματος (6.5.2) και ο αλγόριθμος συγκλίνει για $x_0 = 2$. Σε κώδικα Mathematica βρίσκουμε τη ρίζα σε πέντε επαναλήψεις.

```
Clear[xold, xnew, g, g1, g2];
g[x_] = -x^3 + 1.5  x^2 + 0.5;
g1[x_] = D[g[x], x];
g2[x_] = x - g[x]/g1[x];
xold := 0;
xnew := 2;
i = 1;
While[Abs[xnew - xold] > 0.0000005,
 xold = xnew;
 xnew = g2[xold];
 Print[i++, ". xnew = ", PaddedForm[xnew, 12]]]
```

Το πρόγραμμα αποδίδει: $x_1 = 1.75$, $x_2 = 1.68253968$, $x_3 = 1.67767528$, $x_4 = 1.67765070$ και $x_5 = 1.67765070$.

Αν προσεγγίσουμε την παράγωγο στο σημείο x_n με

$$f'(x_n) = \frac{1}{h}(f(x_n) - f(x_{n-1})) = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$$

στον αλγόριθμο των Newton-Raphson (6.12) προκύπτει μια νέα μέθοδος γνωστή ως μέθοδος της τέμνουσας. Ο αλγόριθμος που προκύπτει έχει τη μορφή

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x)}{\frac{f(x_n)-f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}} = \cdots = \frac{x_{n-1}f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}, \tag{6.15}$$

$$\text{με} \quad n = 1, 2, \ldots \text{ και «κατάλληλα» } x_0 \text{ και } x_1$$

Αποδεικνύεται ([1]) ότι η μέθοδος της τέμνουσας κάτω από κατάλληλες συνθήκες συγκλίνει στη ρίζα της $f(x) = 0$ και η σύγκλιση είναι τάξης $k = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.64$. Η μέθοδος πήρε το όνομά της από το γεγονός ότι η εφαπτομένη της καμπύλης προσεγγίζεται πλέον από μια ευθεία που την τέμνει. Αν συγκρίνει κάποιος τον τύπο (6.15) με εκείνον της (6.4), θα παρατηρήσει τη μεγάλη ομοιότητα που υπάρχει. Ωστόσο η διαδικασία της μιας και της άλλης διαφέρουν σαφώς.

Ασκήσεις

Άσκηση 6.1 *Θεωρούμε τη συνάρτηση $f(x) = 2x^3 - 2x^2 - 1$. Να γίνει η γραφική παράσταση αυτής χρησιμοποιώντας το Mathematica. Να αποδείξετε ότι η εξίσωση $f(x) = 0$ έχει μοναδική ρίζα και να προσδιορίσετε ένα κατάλληλο διάστημα γι΄ αυτή. Να δείξετε ότι οι δύο επόμενοι αλγόριθμοι $x_{n+1} = \frac{1}{3}(x_n + 2 + \frac{1}{x_n^2})$ και $x_{n+1} = \frac{1}{2}(2x_n^2 - \frac{1}{x_n})$ προκύπτουν από τη μέθοδο του σταθερού σημείου. Ποιος από τους δύο συγκλίνει στη ρίζα και γιατί; Να χρησιμοποιήσετε τον αλγόριθμο που συγκλίνει και να κάνετε τρεις επαναλήψεις. Αν χρησιμοποιήσετε το διάστημα που διαλέξατε και τη μέθοδο της διχοτόμησης, ποιος είναι ο ελάχιστος αριθμό επαναλήψεων που χρειάζεστε για να πετύχετε την παραπάνω προσέγγιση; Να χρησιμοποιήσετε τις παραπάνω μεθόδους για να βρείτε τη ρίζα με προσέγγιση 6 δ.ψ.*

Άσκηση 6.2 *Να αποδειχθεί ότι η ακολουθία που ορίζεται από τη σχέση*

$$x_{n+1} = \frac{1}{2}(x_n + \frac{2}{x_n}), \qquad n > 0$$

συγκλίνει στο $\sqrt{2}$, α) $\forall x_0 > 1$ και β) $\forall x_0 > 0$. γ) Χρησιμοποιήστε την παραπάνω ακολουθία για να βρείτε την $\sqrt{2}$ με ακρίβεια δύο(2) δεκαδικών ψηφίων.

Άσκηση 6.3 *Θεωρούμε τη συνάρτηση* $f(x) = 2 - x \ln x$. *α) Να αποδείξετε ότι η εξίσωση* $f(x) = 0$ *έχει μοναδική λύση. β) Να δείξετε ότι ο αλγόριθμος Newton-Raphson συγκλίνει για κάθε αρχική τιμή* $x_0 \geq \xi$, *όπου* ξ *είναι η ρίζα της* $f(x)$. *γ) Να χρησιμοποιήσετε τον αλγόριθμο αυτό για να βρείτε τη ρίζα της εξίσωσης με προσέγγιση τριών δεκαδικών ψηφίων (δ.ψ.).*

Άσκηση 6.4 *Θεωρούμε τη συνάρτηση* $f(x) = x^3 + x^2 - 1$. *α) Να αποδείξετε ότι η εξίσωση* $f(x) = 0$ *έχει μοναδική ρίζα. β) Να προσδιορίσετε ένα κατάλληλο διάστημα γι΄ αυτή, ώστε ο αλγόριθμος Regula-falsi να συγκλίνει. γ) Να χρησιμοποιήσετε τον αλγόριθμο και το Mathematica, για να βρείτε τη ρίζα της εξίσωσης με προσέγγιση έξι δεκαδικών ψηφίων. Επίσης να προσδιορίσετε ένα κατάλληλο διάστημα γι΄ αυτή, ώστε ο αλγόριθμος Newton-Raphson να συγκλίνει. γ) Να γράψετε κώδικα MatLab για τον αλγόριθμο αυτό, για να βρείτε τη ρίζα της εξίσωσης με προσέγγιση έξι δεκαδικών ψηφίων.*

Άσκηση 6.5 *Να δείξετε ότι η εξίσωση* $6xe^{-x} - \frac{3}{e} = 0$ *έχει δύο ρίζες ακριβώς. Στη συνέχεια να βρεθούν οι ρίζες με ακρίβεια 6 δ.ψ. χρησιμοποιώντας κώδικα στο MatLab και στο Mathematica.*

Βιβλιογραφία

[1] **Γ. Ακρίβης, Β. Δουγαλής**: *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*, Παν/κες εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 1997

[2] **L. Brand**: *Μαθηματική Άναλυση*, Ελληνική Μαθηματική Εταιρεία, Αθήνα 1984.

[3] **Α. Γέγιος**: *Αριθμητικές Μέθοδοι*, Τόμος I, Ιωάννινα 1986

[4] **Η. Λιπιτάκης**: *Υπολογιστικές Μέθοδοι Αριθμητικής Ανάλυσης*, έκδοση 2^{η}, Αθήνα 2000.

[5] **Δ. Νούτσος**: *Αριθμητική Ανάλυση και Εφαρμογες*, Ιωάννινα 2002

[6] **Γ. Παπαγεωργίου, Χ. Τσίτουρας**: *Αριθμητική Ανάλυση*, εκδόσεις Συμεών, Αθήνα 2000.

[7] **G. Strang**: *Γραμμική Άλγεβρα*, Παν/κες εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 1996.

[8] **M. Spivak**: *Διαφορικός και Ολοκληρωτικός λογισμός*, Παν/κες εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 1996.

[9] **G. Thomas, R. Finney**: *Απειροστικός Λογισμός*, Τόμος I, Παν/κες εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 1993

[10] **G. Thomas, R. Finney**: *Απειροστικός Λογισμός*, Τόμος II, Παν/κες εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 1993

[11] **Α. Χατζηδήμος**: *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*, Δεύτερη Έκδοση, Ιωάννινα 1980

[12] **Α. Χατζηδήμος**: *Αριθμητική Ανάλυση Ι και ΙΙ*, Δεύτερη Έκδοση, Ιωάννινα 1981

Ευρετήριο